



Fraunhofer Institut
Techno- und
Wirtschaftsmathematik

H. Andrä, J. Linn, I. Matei, I. Shklyar, K. Steiner,
E. Teichmann

OPTCAST – Entwicklung adäquater Strukturoptimierungsverfahren für Gießereien

Technischer Bericht (KURZFASSUNG)

© Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM 2005

ISSN 1434-9973

Bericht 80 (2005)

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche, schriftliche Genehmigung des Herausgebers ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus in irgendeiner Form durch Fotokopie, Mikrofilm oder andere Verfahren zu reproduzieren oder in eine für Maschinen, insbesondere Datenverarbeitungsanlagen, verwendbare Sprache zu übertragen. Dasselbe gilt für das Recht der öffentlichen Wiedergabe.

Warennamen werden ohne Gewährleistung der freien Verwendbarkeit benutzt.

Die Veröffentlichungen in der Berichtsreihe des Fraunhofer ITWM können bezogen werden über:

Fraunhofer-Institut für Techno- und
Wirtschaftsmathematik ITWM
Gottlieb-Daimler-Straße, Geb. 49

67663 Kaiserslautern
Germany

Telefon: +49 (0) 6 31/2 05-32 42
Telefax: +49 (0) 6 31/2 05-41 39
E-Mail: info@itwm.fraunhofer.de
Internet: www.itwm.fraunhofer.de

Vorwort

Das Tätigkeitsfeld des Fraunhofer Instituts für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM umfasst anwendungsnahe Grundlagenforschung, angewandte Forschung sowie Beratung und kundenspezifische Lösungen auf allen Gebieten, die für Techno- und Wirtschaftsmathematik bedeutsam sind.

In der Reihe »Berichte des Fraunhofer ITWM« soll die Arbeit des Instituts kontinuierlich einer interessierten Öffentlichkeit in Industrie, Wirtschaft und Wissenschaft vorgestellt werden. Durch die enge Verzahnung mit dem Fachbereich Mathematik der Universität Kaiserslautern sowie durch zahlreiche Kooperationen mit internationalen Institutionen und Hochschulen in den Bereichen Ausbildung und Forschung ist ein großes Potenzial für Forschungsberichte vorhanden. In die Berichtreihe sollen sowohl hervorragende Diplom- und Projektarbeiten und Dissertationen als auch Forschungsberichte der Institutsmitarbeiter und Institutsgäste zu aktuellen Fragen der Techno- und Wirtschaftsmathematik aufgenommen werden.

Darüberhinaus bietet die Reihe ein Forum für die Berichterstattung über die zahlreichen Kooperationsprojekte des Instituts mit Partnern aus Industrie und Wirtschaft.

Berichterstattung heißt hier Dokumentation darüber, wie aktuelle Ergebnisse aus mathematischer Forschungs- und Entwicklungsarbeit in industrielle Anwendungen und Softwareprodukte transferiert werden, und wie umgekehrt Probleme der Praxis neue interessante mathematische Fragestellungen generieren.

A handwritten signature in black ink, reading "Dieter Prätzel-Wolters". The signature is fluid and cursive, with the first name "Dieter" and last name "Prätzel-Wolters" clearly distinguishable.

Prof. Dr. Dieter Prätzel-Wolters
Institutsleiter

Kaiserslautern, im Juni 2001



Fraunhofer Institut
Techno- und
Wirtschaftsmathematik

OPTCAST – Entwicklung adäquater Strukturoptimierungsverfahren für Gießereien

Technischer Bericht - KURZFASSUNG

H. Andrä
J. Linn
I. Matei
I. Shklyar
K. Steiner
E. Teichmann

Juli 2005

Vorwort

In diesem technischen Report werden die Ergebnisse des Forschungsprojektes „Entwicklung adäquater Strukturoptimierungsmethoden für Gießereien“, das von Januar 2003 bis November 2004 bearbeitet wurde, dokumentiert.

Die positiven Resultate entstanden durch eine intensive und konstruktive Zusammenarbeit der Projektpartner Römheld & Moelle, HegerGuss GmbH, Gebr. Gienanth-Eisenberg GmbH, müllers büro, hg.zwo GmbH und Fraunhofer ITWM.

Am Fraunhofer ITWM wurde das Projekt von Herrn Dr. Linn, Frau Matei, Frau Shklyar und Herrn Teichmann bearbeitet. Herr Dr. Steiner unterstützte die Leitung und Koordination des Projekts. Die Herren Dr. Wiegmann und Kumar Vaikuntam stellten Software-Tools für das Projekt bereit.

Das Projekt konnte nur durch die finanzielle Förderung durch den Europäischen Fonds für regionale Entwicklung – EFRE – und das Ministerium für Wirtschaft, Verkehr, Landwirtschaft und Weinbau Rheinland-Pfalz erfolgreich durchgeführt werden. Im Namen aller beteiligten Projektpartner möchte ich hiermit für diese Unterstützung danken. Insbesondere danke ich Herrn Kling für seine konstruktiven Hinweise und seine Beratung während der gesamten Projektlaufzeit.

Heiko Andrä
Projektleiter

Gefördert durch:



Abstract

Im vorliegenden Bericht werden die Erfahrungen und Ergebnisse aus dem Projekt OptCast zusammengestellt. Das Ziel dieses Projekts bestand (a) in der Anpassung der Methodik der automatischen Strukturoptimierung für Gussteile und (b) in der Entwicklung und Bereitstellung von gießereispezifischen Optimierungstools für Gießereien und Ingenieurbüros.

Gießtechnische Restriktionen lassen sich nicht vollständig auf geometrische Restriktionen reduzieren, da die lokalen Eigenschaften nicht nur von der geometrischen Form des Gussteils, sondern auch vom verwendeten Material abhängen. Sie sind jedoch über eine Gießsimulation (Erstarrungssimulation und Eigenspannungsanalyse) adäquat erfassbar. Wegen dieser Erkenntnis wurde ein neuartiges Topologieoptimierungsverfahren unter Verwendung der Level-Set-Technik entwickelt, bei dem keine variable Dichte des Materials eingeführt wird. In jeder Iteration wird ein scharfer Rand des Bauteils berechnet. Somit ist die Gießsimulation in den iterativen Optimierungsprozess integrierbar.

Keywords: Topologieoptimierung, Level-Set Methode, Gießprozesssimulation, Gießtechnische Restriktionen, CAE-Kette zur Strukturoptimierung.

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung	6
2 Anforderungskatalog	8
2.1 Kombination von Gießereisimulation mit MAGMAsoft und Strukturoptimierung	8
2.2 Kombination von Topologie- und Shapeoptimierung	8
2.3 Ersatz heuristischer Verfahren durch Verfahren der mathematischen Programmierung	9
2.4 Automatische Netzgenerierung und Netzverfeinerung	9
2.5 Handhabbare Software-Lösung	10
2.6 Einfache CAD-Geometrie bezogene Eingabe der Randbedingungen (Lagerung, Lastfälle)	10
2.7 Gießtechnische Restriktionen	11
2.8 Parallelisierung von Strukturanalyse und Optimierungsverfahren . .	11
2.9 Weitere Anforderungen	11
3 Mathematische Formulierung des Optimierungsproblems	13
3.1 Bauraum und Domain	13
3.2 Randwertproblem	13
3.3 Optimierungsproblem	14
4 Integration von beim Gießprozess entstehenden Eigenspannungen in die Strukturoptimierung mittels MAGMAsoft	15
4.1 Motivation	15

4.2	Spannungen und Verzerrungen beim Gießprozess	15
4.3	Optimierungsschleife mit TOSCA, PERMAS und MAGMASoft	16
4.4	Optimierung einer Rahmenstruktur	18
4.5	Bemerkungen	25
5	Prototypische Software zur Topologieoptimierung von Gussteilen: TopLevel	27
5.1	Motivation	27
5.2	Der Algorithmus	28
5.3	Zusammenfassung und Ausblick	34
6	Schnittstellen und Software	36
6.1	Überblick	36
6.1.1	Optimierung mit TOSCA und MAGMASoft	36
6.1.2	Optimierung mit TopLevel, DDFEM und MAGMASoft	39
6.2	GiD-DDFEM Schnittstelle	39
6.2.1	Geometrie	40
6.2.2	Lagerung und Belastung	40
6.2.3	Mengen von Knoten (NSets)	43
6.2.4	Material	43
6.2.5	Vernetzung und Ergebnisse	43
7	Zusammenfassung	45
A	Benchmark-Probleme	49
A.1	Spritzgießmaschine von Römheld & Moelle	49

INHALTSVERZEICHNIS

A.1.1	Schließplatte	50
A.1.2	Stirnplatte	56
A.2	Pressenkopf von Römheld & Moelle	61
A.3	Rundschalttisch von hg2	63
A.4	Kurbelwellenlagerdeckel	68

1 Einführung

Bei der Konstruktion von Maschinenteilen ist neben der Erfüllung von Stabilitätsanforderungen die Minimierung des Gewichts ein entscheidendes Kriterium. Die Integration von automatischen Strukturoptimierungswerkzeugen beim Neudesign oder der Verbesserung von Bauteilen, die nicht nur funktional, sondern in gewissem Sinne optimal sein sollen, gewinnt neuerdings an Bedeutung. Die aus einer Topologieoptimierung resultierenden Formen sind oft sehr komplex und enthalten z.B. fachwerkartige Strukturen, Hohlräume oder gekrümmte Flächen. Dabei kommen manche Herstellungsverfahren (z.B. Umformen, Gesenkschmieden) an ihre Grenzen.

Das Gießen bietet unter allen Produktionstechniken im Bereich Urformen die größtmögliche geometrische Flexibilität und ermöglicht dadurch eine kostengünstige Herstellung strukturoptimierter komplexer Bauteile unter relativ geringen Restriktionen an die Konstruktion. Typische Optimierungsziele für Gussteile sind Massen- und Nachgiebigkeitsreduzierung wie bei anderen Konstruktionen. Jedoch spielen Eigenspannungen und inhomogenes Materialverhalten eine wesentliche Rolle. Gießtechnische Restriktionen lassen sich also nicht vollständig auf geometrische Restriktionen reduzieren. Die lokalen Eigenschaften hängen nicht nur von der geometrischen Form des Gussteils, sondern auch vom verwendeten Material ab. Sie sind jedoch über eine Gießsimulation (Erstarrungssimulation und Eigenspannungsanalyse) adäquat erfassbar.

Wegen dieser Erkenntnis wurde ein neuartiges Topologieoptimierungsverfahren unter Verwendung der Level-Set-Technik entwickelt, bei dem keine variable Dichte des Materials eingeführt wird. In jeder Iteration wird ein scharfer Rand des Bauteils berechnet. Somit ist die Gießsimulation in den iterativen Optimierungsprozess integrierbar.

Im vorliegenden Bericht werden die Erfahrungen und Ergebnisse aus dem Projekt OptCast zusammengestellt. Das Ziel dieses Projekts bestand (a) in der Anpassung der Methodik der automatischen Strukturoptimierung für Gussteile und (b) in der Entwicklung und Bereitstellung von gießereispezifischen Optimierungstools für Gießereien und Ingenieurbüros.

Der Bericht ist wie folgt aufgebaut: Abschnitt 2 erläutert die Aufgabenstellung in Form eines Anforderungskatalogs, der auf Basis von Optimierungsrechnungen mit einer CAE-Kette im ersten Projektabschnitt entwickelt wurde. Die Ergebnisse dieser Testrechnungen sind in Anhang A dargestellt. Abschnitt 3 beinhaltet eine mathematische Beschreibung des Optimierungsproblems. In Abschnitt 4 wird die Integration von beim Gießen

entstehenden Eigenspannungen in den Optimierungsprozess anhand eines akademischen Beispiels beschrieben. Im Projekt wurden erste Resultate auf diesem Gebiet erzielt. Abschnitt 5 beschreibt die Algorithmen der prototypische Software TopLevel, die im Rahmen des Projekts entwickelt wurde, um Schwachstellen der CAE-Kette zu vermeiden. Die Schnittstellen, die implementiert wurden, um das Aufsetzen von Optimierungsproblemen zu erleichtern, sind in Abschnitt 6 geschildert. Im letzten Abschnitt werden die Ergebnisse des Projekts OptCast nochmals kurz zusammengefasst.

2 Anforderungskatalog

Im ersten Projektabschnitt wurde eine CAE-Kette zur Strukturoptimierung aufgebaut und anhand von sogenannten Benchmark-Problemen, die von den Projektpartnern spezifiziert wurden, getestet. Die Ergebnisse dieser Testrechnungen sind in Anhang A dargestellt. Die Analyse der Ergebnisse hat zahlreiche Schwächen der CAE-Kette aufgedeckt und zur Erstellung eines Anforderungskatalogs geführt. Im Folgenden werden die einzelnen Punkte aufgeführt und der Stand der Lösung der jeweiligen Anforderung skizziert. Detailliertere Beschreibungen der Lösungen finden sich in den Kapiteln 4 bis 6.

2.1 Kombination von Gießereisimulation mit MAGMAsoft und Strukturoptimierung

Der Vergleich der Prüfungsergebnisse eines von der Fa. Römheld&Möller abgegossenen Probekörpers mit einer am ITWM durchgeführten Erstarrungssimulation für diesen Probekörper hat gezeigt, dass es nicht ausreicht, nur geometrische Zielgrößen bei der Optimierung zu berücksichtigen.

Anforderung: In die Strukturoptimierung sollen gießtechnische Parameter wie z.B. Temperaturgradient, Erstarrungszeit oder Porositäten sowie Material- und Gefügeeigenschaften mittels einer Gießsimulation einbezogen werden. Die aus der Gießsimulation resultierenden Eigenspannungen sollen bei der Strukturanalyse berücksichtigt werden.

Lösung: Die Auswirkungen der Berücksichtigung der Eigenspannungen wurden beispielhaft an einem akademischen Beispiel demonstriert (vgl. Kapitel 4). Dabei wurde die Topologieoptimierung mit TOSCA durchgeführt.

2.2 Kombination von Topologie- und Shapeoptimierung

Mit Version 5 von TOSCA ist es nicht möglich, das Ergebnis einer Topologieoptimierung sofort als FE-Modell für die Shapeoptimierung einzusetzen. Es muss ein neues FE-Netz manuell generiert werden. Weiterhin ist die erneute manuelle Eingabe der Randbedingungen (Lagerungen und Lastfälle) erforderlich, was einen großen Zeitaufwand bedeutet. Auch aus der mit Hilfe von TOSCA.Smooth geglätteten Lösung kann keine Strukturanalyse automatisch angeschlossen werden, da weder das Volumennetz noch die Randbedingungen übertragen werden.

Anforderung: Ziel ist eine automatische Verknüpfung von Topologie- und Shapeoptimierung. Für das optimierte Modell soll ohne manuellen

Zusatzaufwand eine Strukturanalyse zur Kontrolle der Ergebnisse durchgeführt werden können.

Lösung: In der prototypischen Software TopLevel (vgl. Kapitel 5) ist die Shapeoptimierung in die Topologieoptimierung integriert. In jedem Iterationsschritt wird die optimierte Struktur vollautomatisch neu vernetzt. Außerdem werden die Randbedingungen automatisch auf das neu generierte Netz übertragen. Diese beiden Schritte erlauben ohne jeden manuellen Aufwand die Strukturanalyse für die optimierte Bauteilvariante.

2.3 Ersatz heuristischer Verfahren durch Verfahren der mathematischen Programmierung

Zur Lösung des Benchmarkproblems "Schließplatte" (vgl. A.1.1) wurde die Topologieoptimierungssoftware TOSCA, die ohne Verfahren der mathematischen Programmierung arbeitet, eingesetzt. Das verwendete Lösungsverfahren hat die Belastung durch eine Verschiebungsvorgabe nicht angemessen berücksichtigt, so dass die Struktur trotz der Belastung in zwei Teile zerfiel.

Anforderung: Anstelle der heuristischen Verfahren sind mathematisch besser begründete Optimierungsmethoden einzusetzen. Dies gilt insbesondere, wenn die Zielfunktion nicht nur Vergleichsspannungen, sondern auch weitere Zielgrößen berücksichtigen soll.

Lösung: Bei der Topologieoptimierung mit TopLevel kann außer einem heuristischen Verfahren auch die Methode des topologischen Gradienten, die auf einer streng mathematischen Herleitung basiert, gewählt werden. Der topologische Gradient benutzt die Nachgiebigkeit als Zielfunktion. Für multikriterielle Optimierung mit allgemeinen Zielfunktionen müssen andere Verfahren gesucht werden bzw. muss der topologische Gradient neu berechnet werden.

2.4 Automatische Netzgenerierung und Netzverfeinerung

Die Notwendigkeit der manuellen Neuvernetzung (vgl. Abschnitt 2.2) hat bei der Bearbeitung der Benchmarkprobleme einen sehr hohen Zeitaufwand verursacht.

Anforderung: Im Verlauf des Optimierungsprozesses muss die optimierte Struktur in jeder Iteration entweder komplett neu vernetzt werden, wenn sich die Topologie stark geändert hat, oder das FE-Netz muss automatisch verfeinert werden, wo die Änderung der Topologie dies erforderlich macht. Die lokale Netzverfeinerung soll auch zur Erhöhung der Genauigkeit der Strukturanalyse verwendet werden (Adaptivität).

Lösung: Die vollautomatische Neuvernetzung wurde in TopLevel implementiert. Es wurden die FE-Netzgeneratoren Netgen, TetGen und TetMesh ausprobiert, schließlich aber TetMesh aufgrund der hohen Robustheit favorisiert. Adaptive Netzverfeinerung wurde nicht implementiert.

2.5 Handhabbare Software-Lösung

Die Software-Kette zur Topologieoptimierung soll eine Speziallösung für die Optimierung von Gussteilen darstellen. Sie wird nicht so universelle Strukturoptimierungsprobleme wie z.B. TOSCA lösen können, soll jedoch weniger Eingabeaufwand von Optionen und Parametern erfordern.

Anforderung: Die Software-Tools sollen eine einfache und möglichst einheitliche Benutzeroberfläche haben. Die Eingabe von Parametern soll nur in geringem Umfang erforderlich sein.

Lösung: Mit GiD wurde ein relativ einfaches Tool zur Erstellung der Eingabedateien ausgewählt. Die GiD-DDFEM-Schnittstelle (vgl. Abschnitt 6.2) erlaubt den Aufruf des Solvers direkt aus GiD. DDFEM und TopLevel werden über Kommandozeile gesteuert und können im Batchbetrieb angesprochen werden.

2.6 Einfache CAD-Geometrie bezogene Eingabe der Randbedingungen (Lagerung, Lastfälle)

In den Gießereien arbeiten keine FEM-Berechnungsingenieure und es existiert keine entsprechende FE-Software.

Anforderung: Es soll möglich sein, Lagerungen und Lastfälle in der den Konstrukteuren vertrauten CAD-Umgebung zu definieren.

Lösung: Mit der Verwendung des FE-Pre- und -Postprozessors GiD wurde eine Möglichkeit geschaffen, Randbedingungen auf geometrischen Größen (Flächen, Linien, Punkten) zu definieren. Die Software überträgt die Größen automatisch auf die Knoten und Elemente des FE-Netzes. Weiterhin wurde eine Schnittstelle geschrieben, die es erlaubt, die Daten aus GiD direkt im Eingabe-Format des parallelen FE-Lösers DDFEM zu exportieren, was das Aufsetzen des Optimierungsprozesses stark vereinfacht. Über die Behandlung von Randbedingungen hinaus besteht in GiD die Möglichkeit, Elementsets zu definieren, die benutzt werden können, um feste und freie Bereiche des Bauteilrandes festzulegen.

2.7 Gießtechnische Restriktionen

Wie in Abschnitt 2.1 beschrieben, reicht es nicht aus, nur geometrische Restriktionen bei der Topologieoptimierung zu berücksichtigen. Es müssen gießtechnische Restriktionen hinzugefügt werden.

Anforderung: Folgende gießtechnischen Restriktionen sind mindestens notwendig:

- Entformbarkeitsrestriktion (Mittlebene, Auszugsrichtung, Dichtheit bzw. Dicke der Mittlebene)
- Entformungswinkel bzw. Wandschräge
- Mindeststrebendicke (minimum member size)
- Maximale Strebendicke (maximum member size)
- Symmetriebedingungen (Ebenen-, Punkt-, Rotationssymmetrie, zyklische Symmetrie, Kopplung bestimmter Bereiche im Modell)

Lösung: Version 5.0 von TOSCA berücksichtigt alle geforderten gießtechnischen Restriktionen. Mit der Fa. FE-Design besteht eine enge Zusammenarbeit (gemeinsame Entwicklung der TOSCA-Permas-Schnittstelle), so dass weitere Funktionalitäten dieser Art von FE-Design ergänzt werden können. TopLevel kann keine gießtechnischen Restriktionen berücksichtigen.

2.8 Parallelisierung von Strukturanalyse und Optimierungsverfahren

Sollen die Rechenzeiten für die Topologieoptimierung relativ gering gehalten werden, dann ist eine hausinterne Software-Lösung für die Gießereien nicht praktikabel. Es bietet sich folgender Ausweg an: Die Gießereien bereiten hausintern den Optimierungslauf vor, der dann am ITWM auf dem Linux-Cluster durchgeführt wird. Die Bewertung der Resultate ist wiederum bei den Gießereien möglich. Die Leistungsfähigkeit des Linux-Clusters kann nur ausgenutzt werden, indem große Teile der Software parallelisiert werden.

Anforderung: Idealerweise sollen alle Komponenten des Optimierungsverfahrens parallelisiert werden.

Lösung: Der am ITWM entwickelte parallele FE-Löser DDFEM und eine parallele Version von MAGMASoft sind am ITWM im Einsatz, d.h. die Strukturanalyse ist parallelisiert. Der Optimierer (TOSCA, TopLevel) arbeitet bislang allerdings nicht parallel.

2.9 Weitere Anforderungen

Neben den genannten Punkten wurden noch folgende Anforderungspunkte in Betracht gezogen:

- Bereitstellung von a-posteriori Fehlerschätzern.
- Ersetzung oder Umgehung der Kommunikation zwischen Optimierungssoftware und FE-Löser über ASCII-Dateien.
- Automatisierte Prüfung der maximalen Spannung auf Zulässigkeit.

Diese Punkte wurden im Rahmen des Projekts nicht bearbeitet.

3 Mathematische Formulierung des Optimierungsproblems

Um die Problemstellung zu präzisieren, wird in diesem Abschnitt das Optimierungsproblem mathematisch formuliert.

3.1 Bauraum und Domain

Es wird ein Problem der linearen Elastizität betrachtet. Der Bauraum (engl. design space) Ω_{DS} sei eine offene und beschränkte Teilmenge des \mathbb{R}^3 mit Rand $\partial\Omega_{DS} = \Gamma_D \cup \Gamma_F \cup \Gamma_N$, wobei gilt $\text{meas } \Gamma_D > 0$. Ω_{DS} ist das Gebiet, das das Bauteil maximal einnehmen darf. Für die Struktur $\Omega \subseteq \Omega_{DS}$ gilt $\partial\Omega = (\Gamma_D \cap \partial\Omega) \cup \Gamma_F \cup (\Gamma_N \cap \partial\Omega) \cup \Gamma_0$, wobei $\text{meas } (\Gamma_D \cap \partial\Omega) > 0$ und $\Gamma_0 = \partial\Omega \cap \Omega_{DS}$. Ω ist mit einem linear elastischen Material ausgefüllt.

Abbildung 1 stellt den Bauraum und die Struktur schematisch dar.

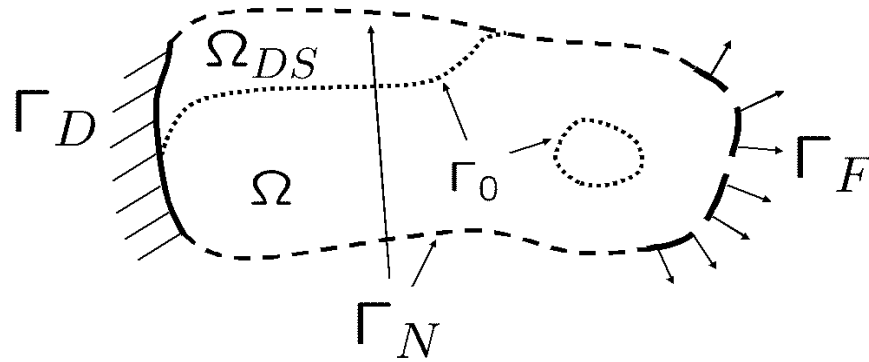


Abbildung 1

Schematische Darstellung von Bauraum und Struktur

3.2 Randwertproblem

Für eine gegebene Last $t \in (H^{-1/2}(\Gamma_F))^3$ lauten die Gleichungen der linearen Elastizität für die Verschiebung u :

$$\begin{aligned} -\text{div}(C : \varepsilon(u_\Omega)) &= 0 \text{ in } \Omega, \\ u_\Omega &= 0 \text{ auf } \Gamma_D \cap \partial\Omega, \\ (C : \varepsilon(u_\Omega))\mathbf{n} &= t \text{ auf } \Gamma_F, \\ (C : \varepsilon(u_\Omega))\mathbf{n} &= 0 \text{ auf } (\Gamma_N \cap \partial\Omega) \cup \Gamma_0. \end{aligned}$$

Dabei ist C der Steifigkeitstensor 4. Ordnung, $\varepsilon(u_\Omega) = \frac{1}{2}(\nabla u_\Omega + \nabla u_\Omega^T)$ der linearisierte Verzerrungstensor und \mathbf{n} die äußere Normale auf Γ .

Die variationelle Formulierung dieses Problems ist: Finde $u_\Omega \in \mathcal{V}_{*\Omega}$, so dass $a(u_\Omega, v) = l(v) \quad \forall v \in \mathcal{V}_\Omega$. $\mathcal{V}_{*\Omega} = \mathcal{V}_\Omega = \{v \in (H^1(\Omega))^3 : v|_{\Gamma_D} = 0\}$ ist der Raum der Testfunktionen. Es ist allgemein bekannt, dass für dieses Problem eine eindeutig bestimmte Lösung u_Ω existiert.

3.3 Optimierungsproblem

Die Zielfunktion sei $j(\Omega) = J(\Omega_\Omega, u_\Omega)$. Soll beispielsweise die Nachgiebigkeit minimiert werden, so gilt $j(\Omega) = \int_{\Gamma_F} t \cdot u_\Omega ds$. Die Menge der zulässigen Strukturen sei $U_{zul} = \{\Omega \in \mathcal{W} : \Omega \subseteq \Omega_{DS}, \Gamma_F \subset \partial\Omega, meas(\Gamma_D \cap \partial\Omega) \neq 0\}$. V_{max} bezeichne das maximal zulässige Volumen.

Das vollständige Optimierungsproblem ist damit:

$$\begin{aligned} & \min_{\Omega \in \mathcal{U}_{zul}} J(\Omega, u_\Omega) \\ & \text{unter den Nebenbedingungen} \quad \int_{\Omega} dx \leq V_{max} \\ & \text{und} \quad a(u_\Omega, v) = l(v) \quad \forall v \in \mathcal{V}_\Omega. \end{aligned}$$

4 Integration von beim Gießprozess entstehenden Eigenspannungen in die Strukturoptimierung mittels MAGMASoft

4.1 Motivation

Eigenspannungen sind die Konsequenz von Wechselwirkungen zwischen Temperatur, Deformation und Mikrostruktur. Zu den charakteristischen materialbezogenen Größen, die die Entstehung von Eigenspannungen beeinflussen, gehören unter anderem Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität, thermischer Ausdehnungskoeffizient, E-Modul, Querkontraktionszahl und plastisches und thermodynamisches Verhalten. Eigenspannungen können z.B. beim Gießprozess bzw. der Abkühlung und Erstarrung von Gussteilen entstehen. Vorzeitiger „*Shakeout*“ von Gussteilen aus Formen kann neben Variationen in der Härte des Materials auch hohe Eigenspannungen hervorrufen.

Eigenspannungen können sich nachteilig auf den Produktionsprozess und die Leistungsfähigkeit eines Bauteils auswirken. Wenn sie groß genug sind, können Eigenspannung auch bei normaler Belastung feine Risse (Schädigung) im Bauteil verursachen. Aufgrund von Eigenspannungen können Gussteile versagen, selbst wenn sie unter Bedingungen und Lasten eingesetzt werden, für die die Haltbarkeit eigentlich garantiert ist, wenn die Eigenspannungen vernachlässigt werden. Außerdem können Eigenspannungen zu Spannungskorrosion führen, d.h. sie begünstigen die Entstehung von Rissen in Bauteilen, die der Korrosion ausgesetzt sind.

Die genannten Tatsachen legen es nahe, Eigenspannungen in der Strukturanalyse und -optimierung zu berücksichtigen. Es ist wünschenswert, durch Designveränderungen eine gleichmäßige Verteilung oder sogar eine Reduktion der Eigenspannungen zu erzielen und so haltbarere Bauteile mit besseren Eigenschaften zu produzieren.

4.2 Spannungen und Verzerrungen beim Gießprozess

Beim Gießen tragen Ausdehnung und Zusammenziehen aufgrund von Temperaturänderungen und Phasenübergängen, Plastizität und Kriechen zur Entstehung von Eigenspannungen bei. Der Verzerrungsgeschwindigkeitsvektor besteht aus elastischen, thermischen und inelastischen Anteilen:

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \dot{\varepsilon}_{ij}^E + \dot{\varepsilon}_{ij}^T + \dot{\varepsilon}_{ij}^P,$$

wobei $\dot{\varepsilon}_{ij}^E$ die elastische Verzerrungsgeschwindigkeit ist, $\dot{\varepsilon}_{ij}^T$ die thermische Verzerrungsgeschwindigkeit (die sowohl Temperaturänderungen als auch

Phasenübergänge beinhaltet) ist und $\dot{\varepsilon}_{ij}^P$ die inelastische Verzerrungsgeschwindigkeit (enthält Plastizität und Kriechen) bezeichnet.

Die Volumenkontraktion des Metalls während der Erstarrung beträgt oft mehrere Prozent des Gesamtvolumens. Dies trägt zu Problemen wie Porosität und Warmriss bei, hat aber wenig Einfluss auf die Eigenspannungen. Diese entstehen wegen der deutlichen Reduktion der Streckgrenze bei hohen Temperaturen hauptsächlich beim Abkühlen des Materials im erstarrten Zustand.

Die thermische Verzerrung, die von Temperaturveränderungen und Phasenübergängen verursacht wird, kann aus dem temperaturabhängigen thermischen Ausdehnungskoeffizienten bestimmt werden:

$$\varepsilon^T = \int_{T_0}^T \alpha(T) dT.$$

Für die numerische Bestimmung des inelastischen Verzerrungsinkrements ist ein inkrementell plastisches Modell geeignet, insbesondere bei den Temperaturen, bei denen die Erstarrung bereits abgeschlossen ist und das Bauteil weiter abkühlt.

Die konstitutiven Gleichungen für den Gießprozess sind

$$\dot{\sigma}_{ij} = c_{ijkl}(\dot{\varepsilon}_{kl} - \dot{\varepsilon}_{kl}^T - \dot{\varepsilon}_{kl}^P)$$

bzw.

$$\dot{\sigma} = C : (\dot{\varepsilon} - \dot{\varepsilon}^T - \dot{\varepsilon}^P),$$

wobei c_{ijkl} der Tensor 4. Ordnung mit den Elastizitätskoeffizienten ist.

Im Folgenden wird beschrieben, wie die Berücksichtigung von beim Gießprozess entstehenden Eigenspannungen bei der Strukturoptimierung im Rahmen des Projekts OPTCAST umgesetzt wurde.

4.3 Optimierungsschleife mit TOSCA, PERMAS und MAGMASoft

Der Ablauf der Strukturoptimierung mit Berücksichtigung der Eigenspannungen ist in Abbildung 2 dargestellt. Ausgangspunkt ist ein FE-Modell der betrachteten Struktur im PERMAS-Format. Dieses Modell wird mit MAGMALink eingelesen und es wird eine *_fem.geo-Datei generiert. Im MAGMA-Präprozessor wird das FE-Modell um die Gussform und Materialbeschreibungen für Gussteil und Form ergänzt, womit die Simulation des Gießprozesses möglich wird.

Integration von beim Gießprozess
entstehenden Eigenspannungen
in die Strukturoptimierung mittels
MAGMASoft

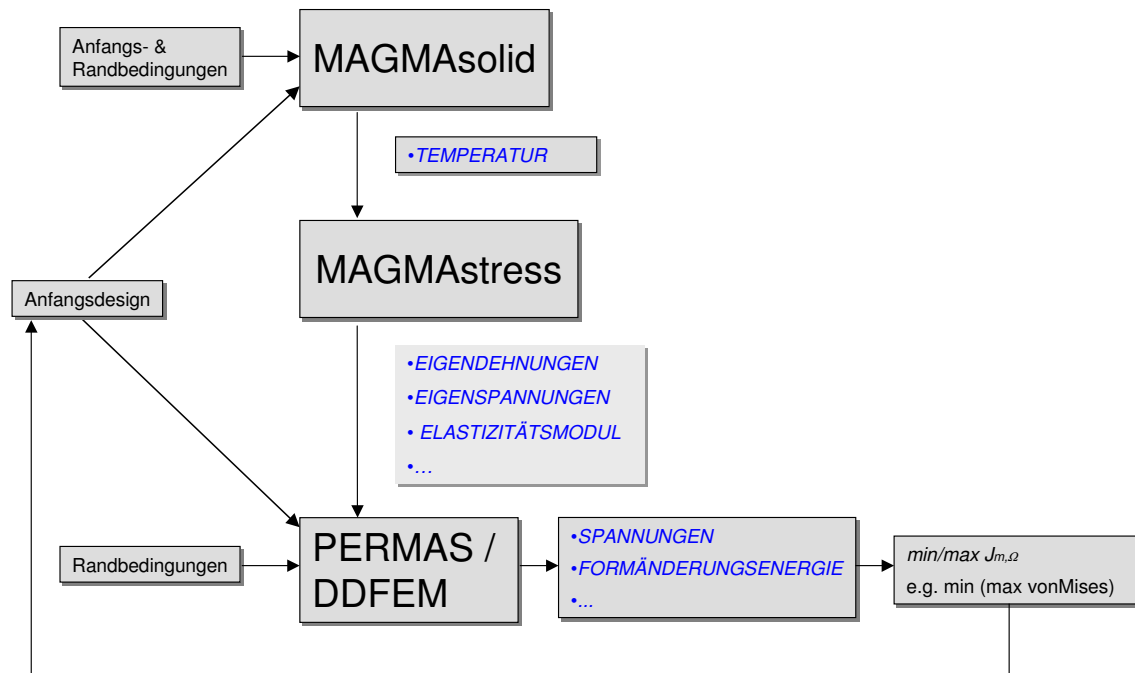


Abbildung 2

Integration von beim Gießprozess entstehenden Eigenspannungen in die Strukturoptimierung mittels MAGMASoft.

Für die Berechnung der Eigenspannungen ist eine komplette Gießsimulation mit Füll- und Erstarrungssimulation nötig. Aus Zeitgründen wurde hier jedoch auf die Füllsimulation verzichtet und direkt die Simulation der Erstarrung und Abkühlung auf Zimmertemperatur mit MAGMASolid durchgeführt. Dabei werden die resultierenden Temperaturverteilungen in hinreichend kleinen Intervallen abgespeichert. Sie dienen als Input für die Berechnung der Eigenspannungen und -dehnungen, die mit MAGMAstress, einem Zusatzmodul von MAGMASoft, ausgeführt wird. Ist die MAGMAshakeout-Option für die Erstarrungssimulation aktiviert, so wird der *Shakeout*-Prozess in der Eigenspannungsberechnung berücksichtigt. MAGMALink übersetzt die MAGMAstress-Ergebnisse in das .dat-Format von PERMAS, das wie folgt in den Input für die Strukturanalyse integriert wird:

Die Gleichung, die in der Strukturanalyse gelöst wird, ist

$$\text{div}(C : (\varepsilon^{\text{tot}} - \varepsilon_M^P)) = 0.$$

Dabei ist C die Steifigkeitsmatrix, ε^{tot} die totale Verzerrung und ε_M^P der plastische Anteil der mechanischen Verzerrung, die von MAGMA berechnet

wird. Da jedoch die mechanische Verzerrung von MAGMA nicht in elastischen und plastischen Anteil getrennt berechnet wird, muss die im Betrieb auftretende Gesamtspannung σ^{tot} aus $\sigma^{tot} = \sigma_{\varepsilon_M^{Mec}} + \sigma_M^r$ berechnet werden, wobei σ_M^r die Eigenspannungen sind und $\sigma_{\varepsilon_M^{Mec}}$ die Lösung eines Elastizitätsproblems mit den von MAGMA berechneten mechanischen Verzerrungen als Anfangsverzerrungen ist.

Um die Parameter für die im Verlauf der Optimierung durchzuführenden Gießprozesssimulationen zu bestimmen, muss vor dem Start der Optimierung dieser Prozess einmal komplett durchgeführt werden. Die Ergebnisse der Strukturanalyse, in diesem Fall die Spannungen, sind Eingabedaten für die Shapeoptimierung mit TOSCA. Über eine Auswertung der Zielfunktion (Minimierung der maximalen von-Mises-Spannung) wird bestimmt, wie die Struktur verändert werden muss. TOSCA schreibt die modifizierte Struktur in ein neues FE-Modell, im PERMAS-Format, das die Eingabe für die nächste Iteration darstellt. Nach einer vorgegebenen Anzahl von Iterationen wird der Prozess abgebrochen.

4.4 Optimierung einer Rahmenstruktur

In diesem Abschnitt wird das in Abschnitt 4.3 beschriebene Vorgehen an einem akademischen Beispiel in Form einer Rahmenstruktur erläutert. Die Betriebslast und Lagerung sind in Abbildung 3 dargestellt: Der Rahmen ist an der Stirnseite eingespannt; an der gegenüberliegenden Seite wirkt eine Zugkraft $p = 0,25 \frac{N}{mm^2}$. Dieser Wert wurde gewählt, damit die Eigenspannungen von derselben Größenordnung sind wie die aus der Belastung resultierenden Spannungen. Damit lässt sich der Einfluss der Eigenspannungen gut verdeutlichen.

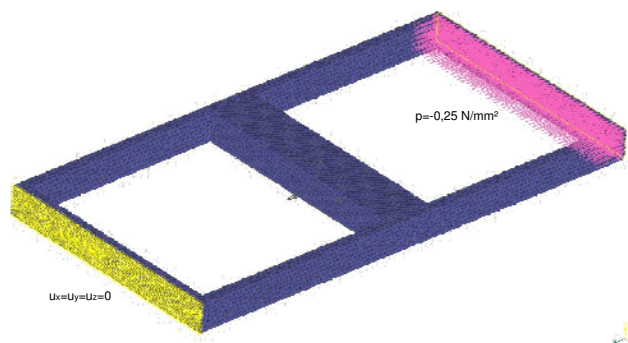


Abbildung 3

Randbedingungen nach der Übertragung auf das FE-Netz.

Als Material wurde Sphäroguss GJS400 mit den folgenden Eigenschaften gewählt: $E = 1,69 \cdot 10^5 \frac{N}{mm^2}$, $\nu = 0,275$ und $\rho = 7,1 \cdot 10^{-9} \frac{t}{mm^3}$. Das FE-Netz für die Strukturanalyse bestand aus 60.858 Tet10-Elementen und 95.533 Knoten (vgl. Abbildung 5 links).

Um den Einfluss des Netzes auf die Genauigkeit der MAGMA-Lösung zu untersuchen, wurde der Rahmen mit einem groben und einem feinen Netz berechnet (vgl. Abbildung 4). Da sich die Resultate deutlich unterscheiden wurde das feine Netz für alle folgenden Berechnungen gewählt.

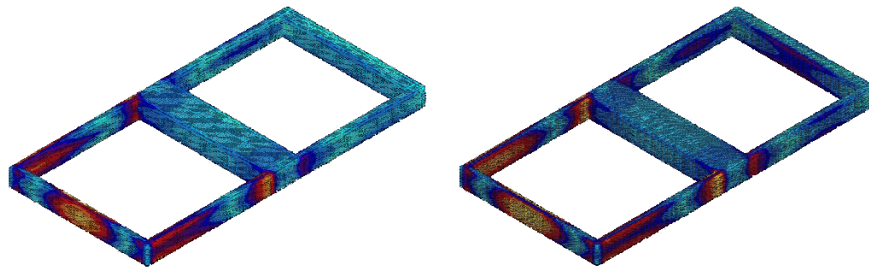


Abbildung 4

MAGMASoft - Einfluss des Netzes. Links: grobes Netz (294.408 Zellen), rechts: feines Netz (597.080 Zellen).

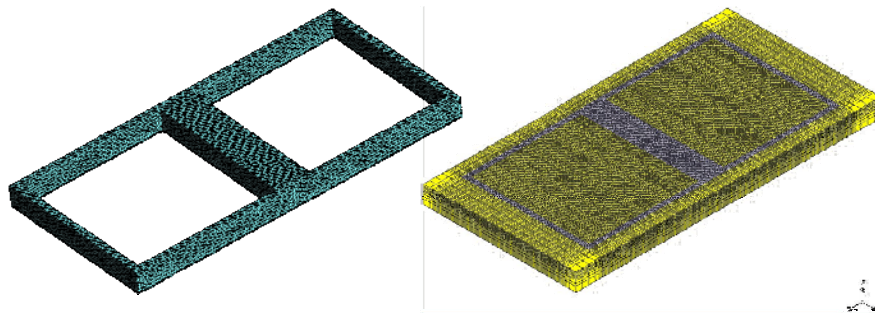


Abbildung 5

In der Optimierungsschleife benutzte Netze. Links: FE-Netz (60.858 Tetraeder mit 10 Knoten pro Element (Tet10) und 95.533 Knoten insgesamt), rechts: MAGMASoft-Netz (597.080 Zellen, 63.648 Metallzellen).

Für die MAGMASoft-Simulation wurde das Material FURAN aus der MAGMASoft-Datenbank für die Sandform benutzt. Die Gusslegierung GJS400 hatte eine Anfangstemperatur von $T_i = 1400^\circ C$, die Liquidus-Temperatur war $T_{liq} = 1168^\circ C$ und die Solidus-Temperatur war $T_{sol} = 1165^\circ C$. Das für die Simulation benutzte Netz bestand aus 597.080 Zellen und 63.648 Metallzellen (vgl. Abbildung 5, rechts). Die Erstarrungssimulation wurde abgebrochen, wenn die Temperatur unter $200^\circ C$ gesunken war. Die Simulation wurde sowohl mit als auch ohne *Shakeout* durchgeführt. Die *Shakeout*-Temperatur war $700^\circ C$.

Die Temperaturverteilung wurde bei 10, 20, ..., 90 und 100 Prozent Erstarrung und bei 1100 °C, 1000 °C, ..., 300 °C und 200 °C gespeichert. Die Ergebnisse der Stressanalyse wurden bei 800 °C, 500 °C, 200 °C und Zimmertemperatur gespeichert, um die Entwicklung der Spannungen als Funktion der Zeit zu sehen (vgl. Abbildung 6). Für die Optimierung wurden nur die Ergebnisse bei Zimmertemperatur verwendet.

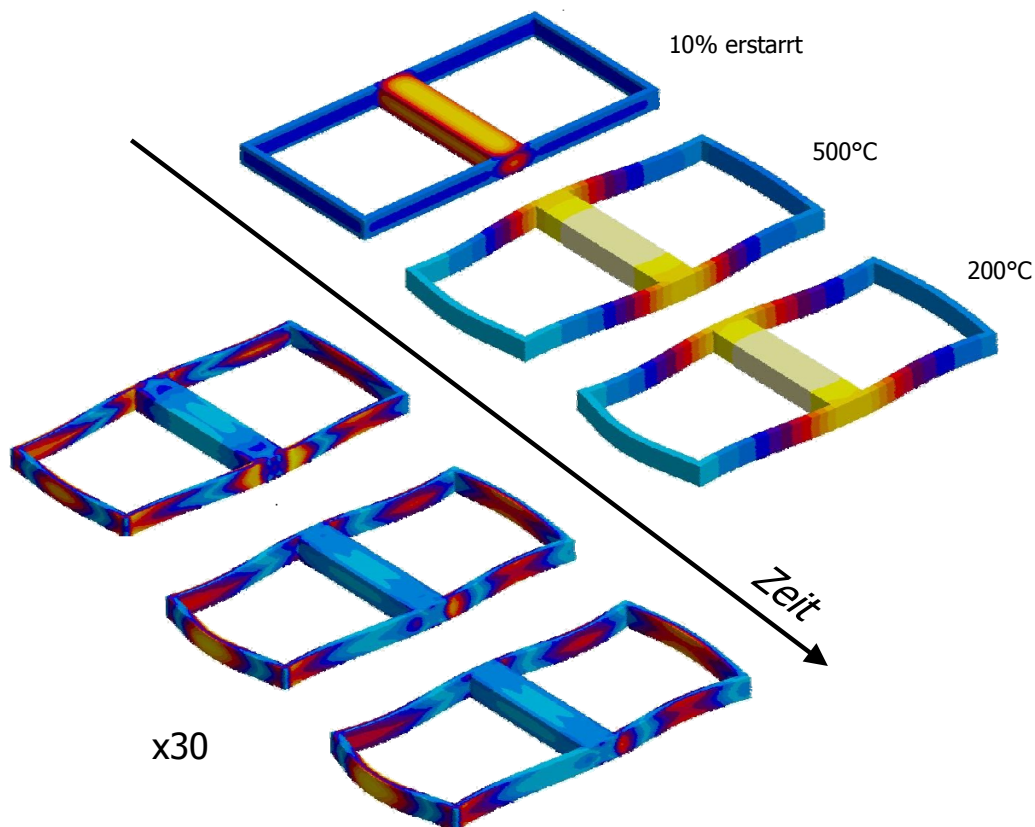


Abbildung 6

Sandguss einer Rahmenstruktur. Temperaturverteilung, Eigenspannungen und Verzerrung.

Die Ergebnisse der Strukturanalyse mit und ohne Berücksichtigung der Eigenspannungen sind in Abbildung 7 (links) bzw. 8 dargestellt.

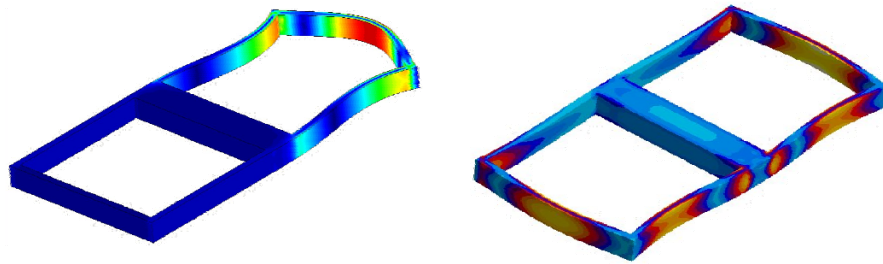


Abbildung 7

Vergleichsspannung für das Originaldesign. Links: ohne Berücksichtigung der Eigenspannungen, rechts: Eigenspannungen.

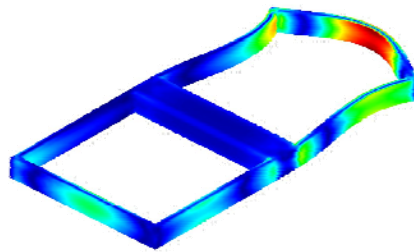


Abbildung 8

Vergleichsspannung für das Originaldesign mit Eigenspannungen.

Der Einfluss der Eigenspannungen auf das Ergebnis der Optimierung ist in Abbildung 9 deutlich sichtbar. Das Volumen des Rahmens wurde in beiden Fällen konstant gehalten. Ohne Berücksichtigung der Eigenspannungen wurde die belastete Seite verstärkt und Material von der anderen Seite weggenommen. Mit Berücksichtigung der Eigenspannungen wurde auch die Seite der Einspannung deutlich modifiziert.

Die Optimierung wurde mit und ohne Volumen-Nebenbedingung durchgeführt. Im Fall des konstanten Volumens wurde der Gießprozess mit und ohne *Shakeout* simuliert. Die Resultate dieser drei Rechnungen sind in den Abbildungen 10, 11 und 12 dargestellt.

Integration von beim Gießprozess
entstehenden Eigenspannungen
in die Strukturoptimierung mittels
MAGMASoft

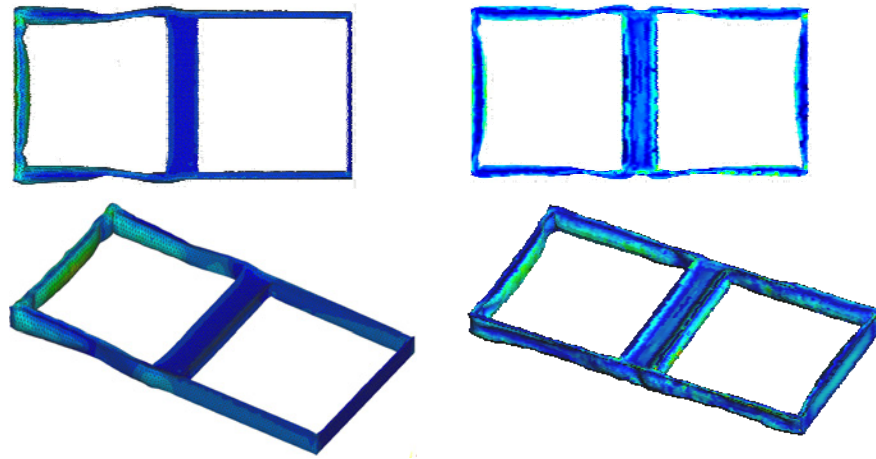


Abbildung 9

Vergleichsspannung für das optimierte Design nach 11 Iterationen. Links: Ohne Eigenspannungen, rechts: mit Eigenspannungen.

Abbildung 10 zeigt das Optimierungsproblem für konstantes Volumen ohne *Shakeout*. Der relative Verlauf der Zielfunktion (von-Mises-Spannung) bzgl. des Anfangswerts für den Prozess mit Berücksichtigung der Eigenspannungen (rote Kurve) und ohne Berücksichtigung der Eigenspannungen (blaue Kurve) werden verglichen. Alle angegebenen Werte wurden den TOSCA-Ergebnissen der Shapeoptimierung entnommen, d.h. sie liegen auf dem Rand der Struktur. Während die blaue Kurve fast monoton fallend und relativ glatt ist, springt die Zielfunktion bei Berücksichtigung der Eigenspannungen stark (nicht monotoner und nicht konvergenter Optimierungsprozess). Das kommt daher, dass die größten Eigenspannungen im Inneren des Bauteils liegen und bei der Shapeoptimierung, in die nur Werte auf dem Rand einfließen, nicht berücksichtigt werden. Für die fünfte Iteration ist der Maximalwert der von-Mises-Spannung auf dem Rand 54,36 MPa, für die Gesamtstruktur ist der Wert dagegen 60,47 MPa. Es wurden neun Optimierungsiterationen durchgeführt. Da der Minimalwert der Zielfunktion unter Berücksichtigung der Eigenspannungen bei der fünften Iteration angenommen wurde, sind im unteren Teil des Bildes die Geometrien dieser Iteration für beide Optimierungen abgebildet. Links oben sind die Eigenspannungen gezeigt, links unten die aus der Betriebslast herrührenden Spannungen und rechts oben die optimale Struktur ohne Eigenspannungen nach neun Iterationen.

Integration von beim Gießprozess
entstehenden Eigenspannungen
in die Strukturoptimierung mittels
MAGMASoft

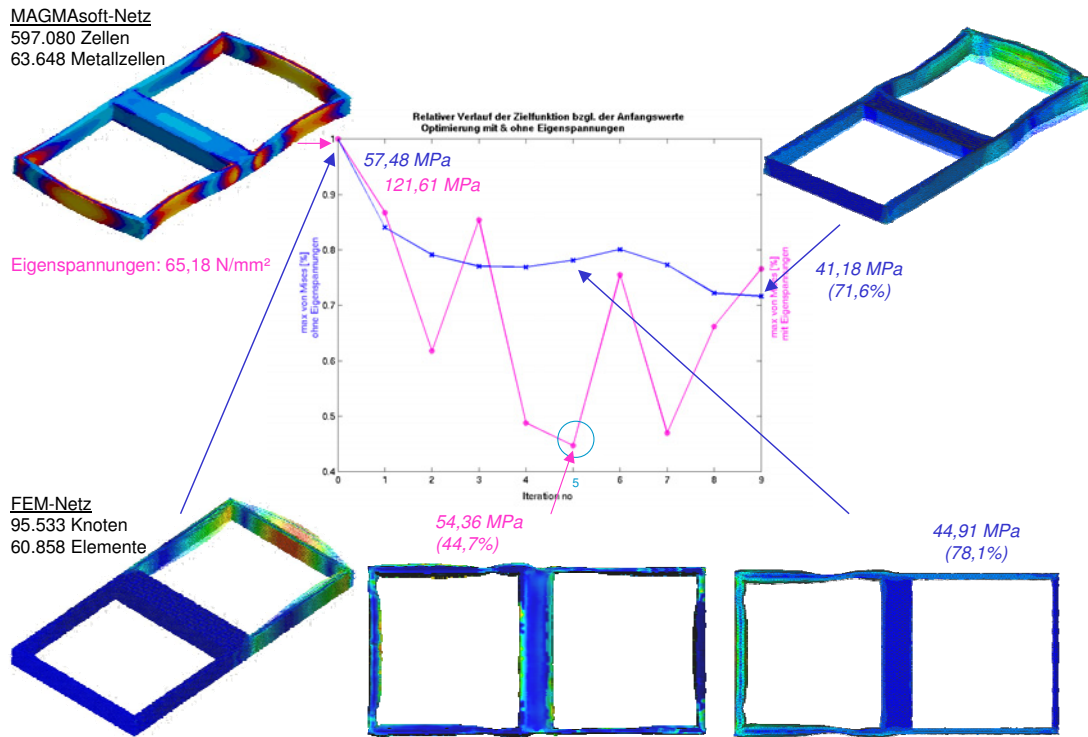


Abbildung 10

Einfluss von Eigenspannungen. Volumen: 100%.

Abbildung 11 ist wie Abbildung 10 aufgebaut. Sie zeigt allerdings das Optimierungsproblem für konstantes Volumen mit *Shakeout*. Es wurden 11 Iterationen durchgeführt. Der Minimalwert der von-Mises-Spannung bei Berücksichtigung der Eigenspannungen trat in der siebten Iteration auf. Offensichtlich hat der *Shakeout* in diesem Beispiel keinen großen Einfluss. Die Tendenz ist in beiden Beispielen jedoch gleich: bei Berücksichtigung der Eigenspannungen wird nicht nur die belastete Seite des Rahmens verändert, sondern auch die Seite der Einspannung.

Integration von beim Gießprozess
entstehenden Eigenspannungen
in die Strukturoptimierung mittels
MAGMAsoft

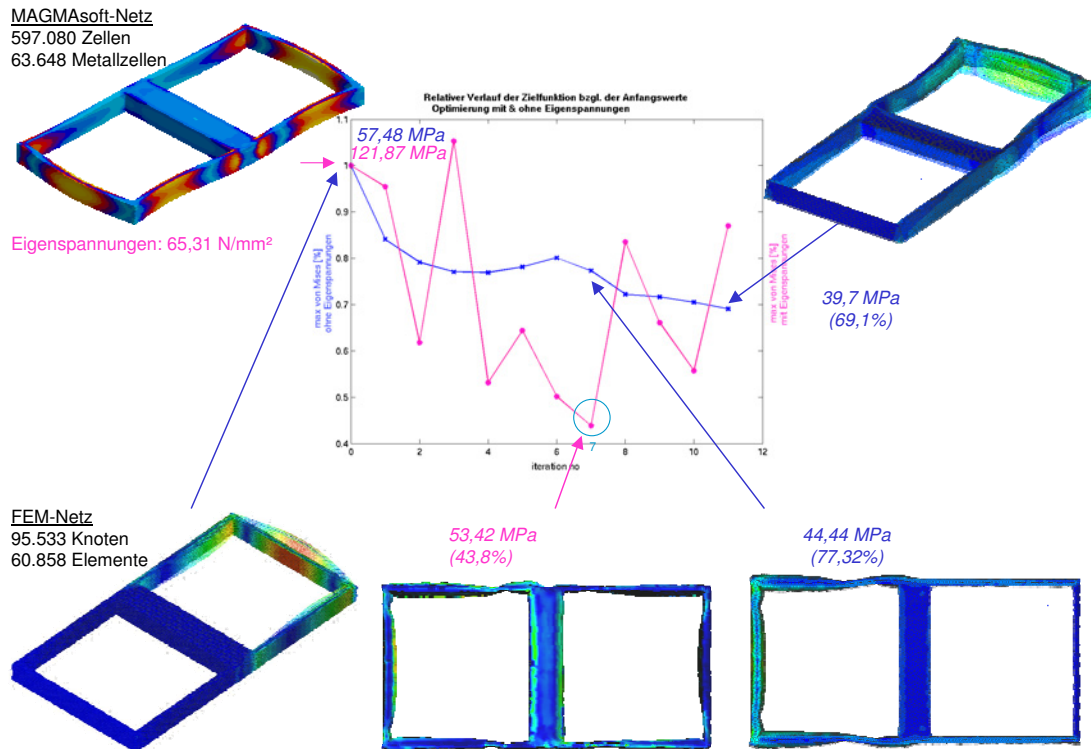


Abbildung 11

Einfluss von Eigenspannungen, die aus einer Gießprozesssimulation mit *Shakeout* resultieren. Volumen: 100%.

Im dritten Beispiel (Abbildung 12) wurde eine Volumen-Nebenbedingung von 70 % des Originalvolumens vorgegeben. Die rote Kurve zeigt jeweils den Verlauf des Volumens, die blaue den Verlauf der Zielfunktion. Sowohl mit als auch ohne Berücksichtigung der Eigenspannungen ist die Nebenbedingung ab der zweiten Iteration erfüllt. Ohne Eigenspannungen nimmt die Zielfunktion von diesem Punkt an monoton ab, während bei Einbeziehung der Eigenspannungen das Minimum nicht in der letzten (sechsten) Iteration angenommen wird. Wie in den oben erklärten Beispielen wurden die optimierten Varianten der Iteration verglichen, in der die Zielfunktion den Minimalwert angenommen hat (fünfte Iteration). Beim Verlauf der Zielfunktion unter Berücksichtigung der Eigenspannungen lässt sich eine ähnliche Tendenz zur Divergenz beobachten wie bei den Optimierungsvarianten ohne Volumen-Nebenbedingung.

Integration von beim Gießprozess
entstehenden Eigenspannungen
in die Strukturoptimierung mittels
MAGMASoft

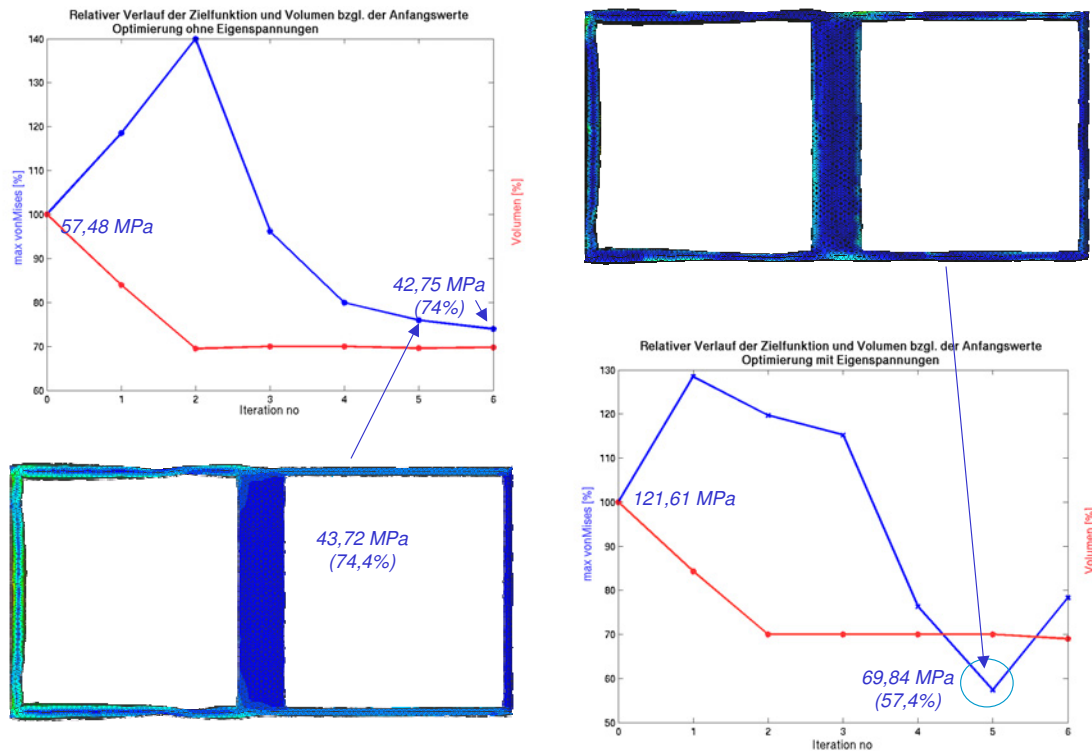


Abbildung 12 Einfluss von Vergleichsspannungen. Volumen: 70%.

4.5 Bemerkungen

Im Verlauf der Optimierung des Rahmens mit TOSCA, PERMAS und MAGMASoft fiel folgendes auf:

- TOSCA führt bei einer Topologieoptimierung Elemente variabler Materialdichte ein. Diese können in MAGMASoft zwar berücksichtigt werden, repräsentieren allerdings kein reelles Bauteil mehr. Deshalb kann mit TOSCA und MAGMASoft nur eine Shapeoptimierung durchgeführt werden. Ein Ausweg für die Topologieoptimierung in Kopplung mit MAGMASoft ist die Benutzung von TopLevel (vgl. Abschnitt 5) statt TOSCA. Nichtsdestotrotz sollte die Zielfunktion den Prozess berücksichtigen, in dem die Eigenspannungen entstehen (Mehrziel-Optimierung).
- Shapeoptimierung wird den Anforderungen, die aus der Berücksichtigung der Eigenspannungen entstehen, nicht gerecht, da die Maximalwerte der

Integration von beim Gießprozess
entstehenden Eigenspannungen
in die Strukturoptimierung mittels
MAGMASoft

Vergleichsspannung nicht notwendigerweise auf dem Rand des Bauteils
liegen, sondern auch im Inneren.

- Bei der Simulation des Gießprozesses sollten Porositäten nicht berücksichtigt
werden, da bei der Erstarrung einige Zellen aufgrund von Schrumpfung
leerlaufen.

5 Prototypische Software zur Topologieoptimierung von Gussteilen: TopLevel

5.1 Motivation

Zur Lösung von Topologieoptimierungsproblemen wurden in der Vergangenheit verschiedene Verfahren entwickelt. Die klassische Methode der Variation des Randes kann beliebige Zielfunktionen behandeln, neigt aber dazu, lokale Minima zu finden, die unter Umständen weit vom globalen Optimum entfernt sind. Die Homogenisierungsmethode hat dieses Problem nicht, aber sie ist hauptsächlich auf Elastizitätsprobleme und Zielfunktionen wie Nachgiebigkeit und Eigenfrequenzen beschränkt. Darüber hinaus sind die Ergebnisse dieser Methode nicht klassische Designs, sondern quasi-uniforme Verteilungen von Materialien verschiedener Dichte. Erst die anschließende Anwendung einer Strafenmethode (penalization method) erzeugt echte Designs. Eine weitere Klasse von Methoden, die der genetischen Algorithmen, produziert klassische Designs, ist aber zu rechenaufwändig um für Industrieprobleme angewendet zu werden.

Im Rahmen der Topologieoptimierung bei Gießereien traten verschiedene Probleme auf:

- Mit Version 5 von TOSCA ist eine automatische Verknüpfung von Shape- und Topologieoptimierung nicht möglich. Es muss ein neues FE-Netz generiert werden und sämtliche Randbedingungen müssen zweimal von Hand eingegeben werden, was einen großen Zeitaufwand erfordert.
- Für eine optimierte Struktur kann selbst nach Glättung mit TOSCA.Smooth keine Strukturanalyse direkt angeschlossen werden, da das Volumennetz und die Randbedingungen nicht übertragen werden.
- Die verwendeten heuristischen Algorithmen liefern nicht für alle Probleme brauchbare Lösungen; die Anwendung von Methoden der mathematischen Programmierung verspricht hier Abhilfe.
- Die Netzgenerierung ist im Allgemeinen sehr zeitaufwändig. In den Gießereien arbeiten keine FE-Spezialisten, die die Qualität eines FE-Netzes beurteilen können. Daher muss eine automatische adaptive Neuvernetzung implementiert werden.

Mit der prototypischen Software TopLevel, die im Rahmen des Projekts OPTCAST entwickelt wurde, zeigt das ITWM die Machbarkeit von Lösungen für die genannten Probleme.

TopLevel löst dreidimensionale Topologieoptimierungsprobleme auf Basis mathematischer Kriterien. Der Bauteilrand wird durch eine Level-Set-Funktion repräsentiert, was die Darstellung der Struktur vom FE-Netz entkoppelt. Die

Verwendung der Level-Set-Funktion macht Topologieänderungen äußerst einfach und ermöglicht gleichzeitig die vollautomatische Neuvernetzung des Bauteils in jeder Iteration. So ist jederzeit ein vollständiges FE-Modell vorhanden. Durch die automatische Übertragung der Randbedingungen ist es kein Problem, in jedem Schritt eine Strukturanalyse durchzuführen. Dazu verwendet TopLevel den parallelen iterativen FE-Löser DDFEM, der am ITWM entwickelt wurde. Shape- und Topologieoptimierung werden integriert durchgeführt. Die Verwendung des topologischen Gradienten ermöglicht die freie Wahl der Zielfunktion und sichert die mathematische Korrektheit der Änderungen der Struktur und die Optimalität der Lösung.

5.2 Der Algorithmus

Zur Lösung dreidimensionaler Topologieoptimierungsprobleme standen folgende Software-Tools zur Verfügung:

- Der finite Elemente Prä- und Postprozessor GiD (entwickelt am CIMNE (International Center for Numerical Methods in Engineering), Barcelona).
- Der iterative parallele finite Elemente-Löser DDFEM (parallel domain decomposition fem), der auf Gebietszerlegung basiert (entwickelt von H. Andrä und D. Stoyanov am Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik Kaiserslautern).
- Das Programm LevelDict für Initialisierung der Level-Set-Funktion und für Contouring (entwickelt von A. Wiegmann und A. Kumar Vaikuntam am Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik Kaiserslautern).
- Der Mesh-Generator TetMesh (entwickelt von INRIA, Guyancourt Cedex, Frankreich).

Dieser Abschnitt beschreibt den Algorithmus für den Fall, dass das Volumen der Ausgangskonfiguration reduziert werden muss, weil die Nebenbedingung nicht erfüllt ist. Es handelt sich also um eine Exterior-Point-Methode. Die reine Volumenreduktion ist eigentlich kein echtes Optimierungsproblem, da der Prozess stoppt, sobald die Menge der zulässigen Strukturen erreicht ist und die Nebenbedingungen erfüllt sind. Ausgehend vom maximalen Volumen, d.h. vom vollständig gefüllten Bauraum, muss eine Zunahme der Nachgiebigkeit erwartet werden, wenn Material entfernt wird. Die Verwendung des topologischen Gradienten garantiert, dass dieser Zuwachs in jeder Iteration so klein wie möglich ist. Um den Anforderungen eines Optimierungsproblems zu genügen und um die Suche nach einer optimalen Lösung innerhalb der Menge der zulässigen Strukturen zu ermöglichen, wurde die Anwendung des topologischen Gradienten wie in diesem Abschnitt beschrieben erweitert.

Skizze: Exterior Point-Methode

Das Grundschema des Algorithmus ist in Abbildung 13 dargestellt.

Ausgangspunkt ist die Beschreibung einer Struktur $\Omega_0 \subset D$, wo D den Bauraum (d.h. die maximal zulässige Domain der Struktur) bezeichnet, zusammen mit einer Spezifikation der Randbedingungen. Diese legt automatisch fest, welche Teile des Randes fixiert sind und welche zum Designrand gehören und verschoben werden dürfen. Das Initialisierungsmodul erzeugt die diskrete Level-Set-Funktion, deren Nullmenge den Rand des Ausgangsbauteils Ω_0 darstellt. Außerdem wird mit DDFEM eine Strukturanalyse des Ausgangsdesigns durchgeführt. Die resultierenden Spannungen und Verschiebungen in den Knoten des FE-Netzes sind Grundlage der Berechnung entweder einer Vergleichsspannung oder des topologischen Gradienten. Dieses Kriterium wird auf die Knoten des regulären Gitters, die der Definitionsbereich der Level-Set-Funktion sind, interpoliert. Die Werte des Kriteriums in den Gitterpunkten erlauben die Berechnung eines Updates der Level-Set-Funktion, was einer Verschiebung des Bauteilrandes gleichkommt. In diesem Schritt wird das Volumen der Struktur verringert. Die neue Level-Set-Funktion wird vom Contouring-Modul in eine Oberflächentriangulierung (STL-Format) umgewandelt. Ist die Nebenbedingung erfüllt, so stoppt der Algorithmus. Andernfalls erzeugt der Meshgenerator TetMesh ein Tetraeder-Netz, das die Basis für die Strukturanalyse des veränderten Bauteils ist. Die Extraktion des Oberflächennetzes aus dem Volumennetz und die Übertragung der Randbedingungen vom ursprünglichen auf das neue Netz schließen die Iterationsschleife, in der die Topologie des Bauteils so verändert wurde, dass es vorgegebene Anforderungen erfüllt.

Die Teilprozesse des Diagramms, die in rechteckige Kästchen eingeschlossen sind, werden von Programmen ausgeführt, die am ITWM zur Verfügung standen. Die Schnittstellen und Routinen in Sechsecken wurden im Rahmen des Projekts OptCast am ITWM neu implementiert.

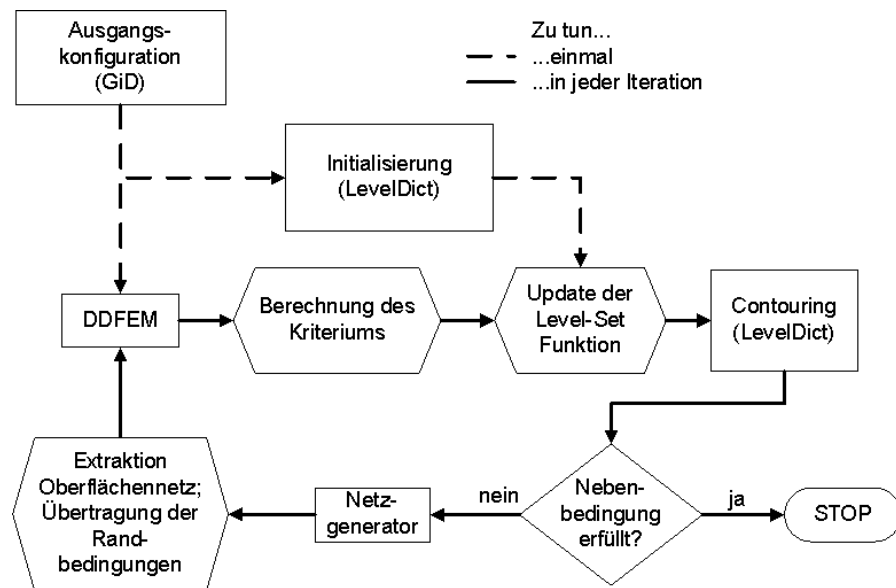


Abbildung 13

Vereinfachte Darstellung des Exterior Point-Algorithmus

Skizze: Interior Point-Methode

Die Grundidee der topologischen Sensitivität ist, Informationen über das Verhalten der Zielfunktion bereit zu stellen und damit die Veränderung von Gestalt und/oder Topologie so durchzuführen, dass die Zielfunktion verringert oder, wenn die Nebenbedingungen nicht erfüllt sind, so wenig wie möglich vergrößert wird. Die Optimierung einer Struktur innerhalb der Menge von zulässigen Strukturen ist äquivalent zur schrittweisen Verlagerung von Material, solange die Zielfunktion verringert werden kann. Hier entsteht das Problem, dass die topologische Sensitivität nicht außerhalb der Struktur berechnet werden kann, d.h. die Abstiegsrichtung ψ^k für die Optimierungsmethode $\varphi^{k+1} = \varphi^k + t_k \psi^k$ kann nicht so bestimmt werden, dass die Struktur wächst. Der topologische Gradient kann also zunächst nicht benutzt werden, um Regionen zu bestimmen, in denen Material hinzugefügt werden soll.

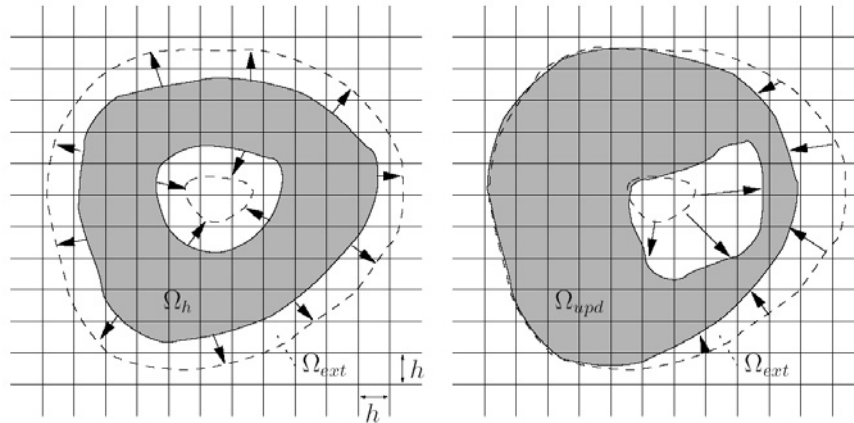


Abbildung 14

Die erweiterten Definitionsbereiche des topologischen Gradienten

Eine Lösung für dieses Problem ist in Abbildung 14 dargestellt. Die Menge aller Gitterpunkte sei mit

$$\omega_h = \omega_{\varphi_h} := \{x : \text{für } i = 1, 2, 3 \ x_i = B_i^{low} + kh \text{ wobei } 0 \leq k \leq \frac{B_i^{up} - B_i^{low}}{h}\}$$

bezeichnet, wobei x_i die i -te Koordinate von x ist und B_i^{low} bzw. B_i^{up} die jeweilige untere bzw. obere Schranke der Box, die die Struktur einschließt, ist. Im ersten Schritt wird die ursprüngliche Domain $\Omega_h = \{x \in \omega_h : \varphi_h(x) \leq 0\}$ systematisch in alle Koordinatenrichtungen vergrößert, indem die Nullmenge der Level-Set-Funktion in jeder Richtung um einen Gitterpunkt in Richtung der äußeren Normalen des Randes verschoben wird. Definiert man die Menge aller Gitterpunkte, die einen Nachbarpunkt $x^* \in \Omega_h$ haben, mit

$$\Omega_{add} := \{x \in \omega_h \setminus \Omega_h : x \text{ hat einen Nachbar } x^* \in \Omega_h\},$$

so ergibt sich die vergrößerte Domain als

$$\Omega_{ext} = \Omega_h \cup \Omega_{add}.$$

Das Volumen des hinzugefügten Materials sei $\Delta = |\Omega_{add}|$.

Anschließend wird die topologische Sensitivität in Ω_{ext} berechnet. Der dritte und letzte Schritt ist, Material vom Volumen Δ zu entfernen und so zum Ausgangsvolumen zurückzukehren. Wie beim Algorithmus für Volumenreduktion wird Material in den Regionen entfernt, in denen der topologische Gradient am kleinsten ist, d.h.

$$\Omega_{upd} = \{x \in \Omega_{ext} : g(x) \leq c\},$$

wobei c so gewählt ist, dass $|\Omega_{upd}| = |\Omega_h|$. Natürlich kann dieser Schritt die Erzeugung und/oder Verschmelzung von Löchern enthalten. Da $|\Omega_{upd}| = |\Omega_h|$ gilt, wird das Material neu angeordnet, aber das Volumen der Struktur nicht verändert.

Im Gegensatz zu einer Extrapolation des topologischen Gradienten oder gar einer heuristischen Ausdehnung garantiert die beschriebene Methode, dass das Material auf optimale Weise bewegt wird. Wenn es nützlich ist, in einer bestimmten Region Material hinzuzufügen, dann ist der topologische Gradient dort groß - wird hier Material entfernt, so resultiert das in einer größeren Zunahme der Nachgiebigkeit. Andererseits hat die Ausdehnung der Struktur keinen Effekt, wo der topologische Gradient klein ist, da das zugefügte Material hier wieder entfernt wird.

Verglichen mit der Beschreibung des Exterior-Point-Algorithmus ist das vereinfachte Diagramm des erweiterten Algorithmus etwas komplexer.

Der Startpunkt ist derselbe wie beim Exterior-Point-Algorithmus. Nach der Initialisierung der Level-Set-Funktion werden mit DDFEM die Spannungen und Verschiebungen im Ausgangsdesign berechnet. Daran schließt sich die Berechnung des topologischen Gradienten an. Jetzt wird die Struktur ausgedehnt, indem die Werte der Level-Set-Funktion auf dem regulären Gitter entsprechend verändert werden. Das Contouring-Modul erzeugt ein Oberflächennetz (STL-Format), das die Grundlage für die Generierung eines Volumennetzes ist. Extraktion des Oberflächennetzes und Übertragung der Randbedingungen auf das neue Netz ermöglichen die Strukturanalyse des vergrößerten Bauteils. Die Ergebnisse dieser Analyse sind die Basis für die Reduktion des Volumens der Struktur auf den ursprünglichen Wert durch erneute Veränderung der Level-Set-Funktion.

Aufgrund der Tatsache, dass bisher alle Berechnungen auf der vergrößerten Struktur durchgeführt wurden, kann nicht entschieden werden, ob ein weiterer Optimierungsschritt nötig ist oder nicht. Um die Nachgiebigkeit der verbesserten

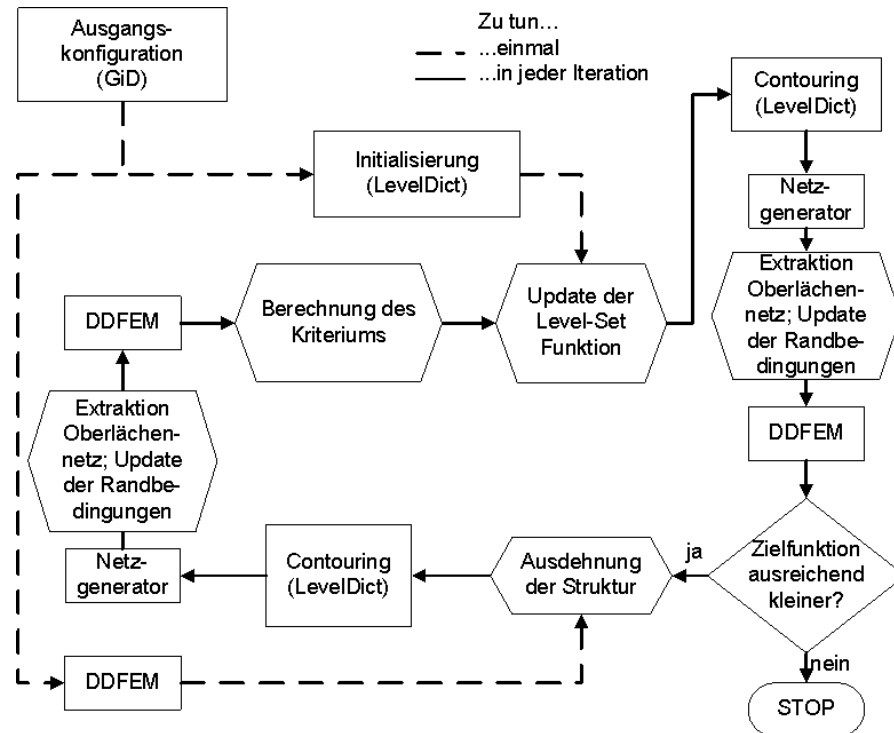


Abbildung 15

Vereinfachtes Diagramm des erweiterten Algorithmus

Struktur zu bestimmen, sind erneut Contouring, Extraktion des Oberflächennetzes, Update der Randbedingungen und eine Strukturanalyse mit DDFEM nötig. Erst danach kann der Wert der Nachgiebigkeit mit dem der vorherigen Struktur verglichen werden. Unterscheiden sich die Werte nicht ausreichend, so stoppt der Algorithmus. Andernfalls kann die Struktur weiter verbessert werden und es wird eine neue Iteration gestartet.

Wie in Abbildung 13 wurden die Teilprozesse in Sechsecken selbst implementiert, während die Module in Rechtecken zur Verfügung standen. Hinzufügen und Wegnehmen von mehr Material durch Verschieben der Level-Set-Funktion um mehr als eine Gitterweite in Richtung der äußeren Normalen ermöglicht die Suche nach weiter entfernten lokalen Minima der Zielfunktion, aber die Abweichung der Werte der topologischen Sensitivität in der ausgedehnten Struktur wird größer.

Der größte Nachteil dieser Methode innerhalb der Topologieoptimierung ist, dass die Notwendigkeit der Bestimmung der Nachgiebigkeit der verbesserten Struktur den Rechenaufwand drastisch erhöht. Generierung des Volumennetzes, Update der Randbedingungen und Strukturanalyse sind die zeitaufwändigsten Elemente der Optimierungsschleife, und abhängig von der Größe des Problems erfordern sie bis zu 60 Prozent der Gesamtrechnenzeit pro Iteration.

Wenn allerdings die Volumenreduktion mittels topologischem Gradienten benutzt wird, um eine Ausgangskonfiguration für die Interior Point-Methode zu erhalten und nur noch geringfügige Korrekturen mit letzterem Verfahren durchgeführt werden müssen, dann sollte die Zahl der notwendigen Iterationen gering sein und der höhere Rechenaufwand sollte nicht zu schwer ins Gewicht fallen.

5.3 Zusammenfassung und Ausblick

TopLevel ist ein prototypisches Programm zur vollautomatischen Topologieoptimierung dreidimensionaler Bauteile, die nur durch Bauraum und Randbedingungen beschrieben sein müssen. Im Gegensatz zur Topologieoptimierung z.B. mit dem kommerziellen Software-Tool Tosca ist keine manuelle Neueingabe von Randbedingungen und kein Re-Design der Struktur nötig. TopLevel verbindet verschiedene Programme (LevelDict-Module für Initialisierung und Contouring, FE-Löser DDFEM, Netzgenerator TetMesh) und enthält alle nötigen Schnittstellen.

Es wurde einen heuristischer und einen auf dem topologischen Gradienten basierender Zugang implementiert und verglichen. Um Interior-Point-Methoden in der Optimierung zuzulassen, wurde die Anwendung der topologischen Sensitivität erweitert. Zur Verbesserung der Qualität der Ergebnisse wurden verschiedene Features, wie z.B. Glättung und Entfernung abgetrennter Teile, hinzugefügt.

Die betrachteten Zielfunktionen waren die von Mises-Vergleichsspannung für den heuristischen Algorithmus und die Nachgiebigkeit für den auf dem topologischen Gradienten basierenden Algorithmus.

Einige Vorteile des entwickelten Algorithmus sind:

- Das Programm kann sowohl bestehende Designs verbessern als auch Designvorschläge für neue Teile liefern.
- Die Repräsentierung des Bauteilrandes mittels Level-Set-Funktion macht Topologieänderungen wie z.B. das Einfügen oder Verschmelzen von Löchern sehr einfach.
- Die Genauigkeit der Randbeschreibung ist unabhängig von der Auflösung des FE-Netzes.
- In jedem Iterationsschritt kann eine Strukturanalyse durchgeführt werden (im Gegensatz zu z.B. Tosca).
- Im Fall der topologischen Sensitivität kann die Zielfunktion um beliebige Kriterien wie z.B. Beschränkung des Umfangs (Maximum Member Size) erweitert werden. Dies ist für den heuristischen Algorithmus nicht möglich.
- Die topologische Sensitivität wird durch Lösung eines adjungierten Problems bestimmt, was den Rechenaufwand verringert. Für die Nachgiebigkeit muss sogar nur ein Problem der linearen Elastizität gelöst werden.

Ein wichtiger Schwachpunkt der beschriebenen Methode ist die Notwendigkeit der Neuvernetzung in jeder Iteration. Dies ist der aufwändigste Teil des Prozesses und benötigt am meisten Rechenzeit.

Dieser Nachteil wird jedoch durch die Tatsache ausgeglichen, dass in jedem Iterationsschritt ein gutes Volumennetz zur Verfügung steht, selbst wenn die Topologie oder das Volumen der Struktur deutlich verändert wurde. Dies macht eine Strukturanalyse in jeder Iteration möglich und ist die Basis für die Ermittlung exakter Werte für Spannungen und Verschiebungen.

Zukünftige Arbeiten auf diesem Gebiet könnten sich mit den folgenden Problemen beschäftigen:

- Reduzierung der Rechenzeit durch effizientere Routinen zum Update der Randbedingungen.
- Verbesserung der Genauigkeit des Randbedingungs-Updates.
- Verfeinerung der Berechnung der Level-Set-Funktion um die Ausnutzung von Symmetrie zu ermöglichen und so den Rechenaufwand zu verringern.
- Erweiterung der Zielfunktion um gießereispezifische Kriterien wie z.B. Maximum Member Size oder Berücksichtigung der Thermo-Elastizität.
- Implementierung adaptiver Schrittweitenkontrolle sowohl für den Algorithmus zur Volumenreduktion als auch für den Interior-Point-Algorithmus.

6 Schnittstellen und Software

6.1 Überblick

Für die Topologieoptimierung wurden im Rahmen des Projekts OPTCAST folgende Programme und Software-Pakete benutzt:

- DDFEM (Eigenentwicklung ITWM)
- GiD [24]
- LevelDict (Eigenentwicklung ITWM)
- MAGMASoft [25]
- MEDINA [26]
- NETGEN [27]
- PERMAS [28]
- Pro/Mechanica [29]
- TetMesh [30]
- TopLevel (Eigenentwicklung ITWM)
- TOSCA [31]

Abbildung 16 gibt einen Gesamtüberblick über die Schnittstellen und Abhängigkeiten. Im Folgenden werden die einzelnen Programmketten näher beschrieben.

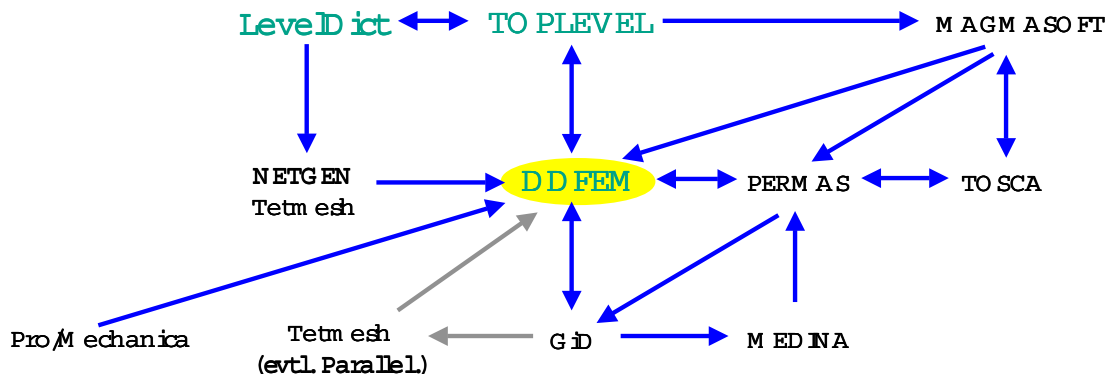


Abbildung 16

Verwendete Software-Tools.

6.1.1 Optimierung mit TOSCA und MAGMASoft

Die Prozesskette für die Topologieoptimierung mit TOSCA ist in Abbildung 17 bzw. 18 dargestellt. Im FE-Preprozessor GiD wird die CAD-Geometrie eines

Bauteils importiert. Zu dieser Geometrie wird ein zweidimensionales Oberflächennetz generiert, das die Basis für Volumennetzgenerierung und Spezifikation der Randbedingungen in MEDINApres ist (Abb. 17). Um den Vorgang zu vereinfachen, wurde am ITWM eine Schnittstelle implementiert, die es erlaubt, die Randbedingungen und das Volumennetz direkt in GiD zu generieren (Abb. 18). Da die Volumenvernetzung in GiD nicht besonders stabil ist, wird empfohlen, den Volumennetzgenerator in GiD durch TetMesh zu ersetzen, das auch von MEDINApres benutzt wird. Das Netz und die Randbedingungen können wahlweise im Input-Format von DDFEM (.in) oder von PERMAS (.dat) geschrieben werden.

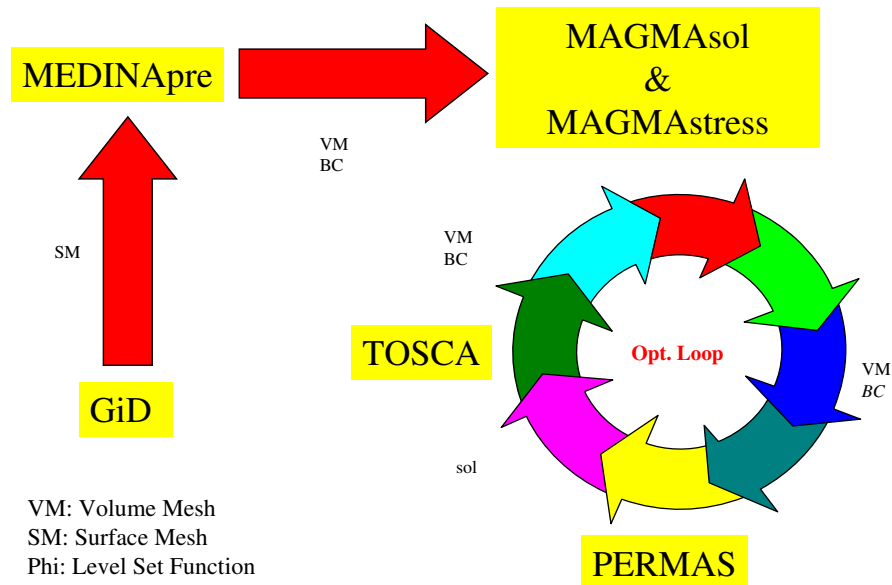


Abbildung 17

Prozesskette für Shapeoptimierung mit TOSCA, PERMAS und MAGMASoft, Variante 1.

Wenn die Eigenspannungen im Optimierungsprozess berücksichtigt werden sollen, dient das .dat-Format als Input für MAGMALink, das eine Eingabedatei für MAGMASoft (.geo) generiert. Die aus der MAGMAstress-Rechnung resultierenden Eigendehnungen werden von MAGMALink ins PERMAS-Format übersetzt und in die oben erzeugte .dat-Datei als Anfangsdehnungen ("initial strains") integriert. Anschließend wird eine Strukturanalyse mit PERMAS durchgeführt. Zu den so ermittelten Spannungen werden die von MAGMAstress berechneten Eigenspannungen addiert. Die Gesamtergebnisse werden durch die am ITWM entwickelte Schnittstelle PERMAS-TOSCA im .onf-Format für eine Optimierungsiteration bereitgestellt. TOSCA schreibt die Ergebnisse der Optimierung (verändertes FE-Modell) in eine .dat-Datei, die wieder Input für MAGMALink ist. Damit wird die Optimierungsschleife geschlossen. Statt mit

PERMAS kann die Strukturanalyse auch mit DDFEM durchgeführt werden. Dazu wurde die dat2in-Schnittstelle am ITWM entwickelt. Die Ergebnisse der Optimierung können entweder in GiDpost (wenn DDFEM für die Strukturanalyse benutzt wurde, .msh und .res-Dateien) oder in MEDINApост (Strukturanalyse mit PERMAS, .post-Ausgabeformat) visualisiert werden.

Soll nicht nur eine Shape-, sondern eine Topologieoptimierung durchgeführt werden, dann kann MAGMASoft in der gerade beschriebenen Konstellation nicht verwendet werden, da TOSCA Elemente mit variabler Materialdichte einführt, die in MAGMASoft zwar berücksichtigt werden können, aber kein reelles Bauteil mehr repräsentieren. Ein Ausweg wäre höchstens die Konstruktion einer Isofläche mit einer Dichte $\rho \in (0, 1)$ und die Verwendung dieser Isofläche als Bauteilrand. Topologieoptimierung (auch in Kombination mit Shapeoptimierung) ist nur möglich, wenn die Eigenspannungen und -dehnungen vernachlässigt werden und MAGMASoft nicht in die Programmkette eingebunden ist.

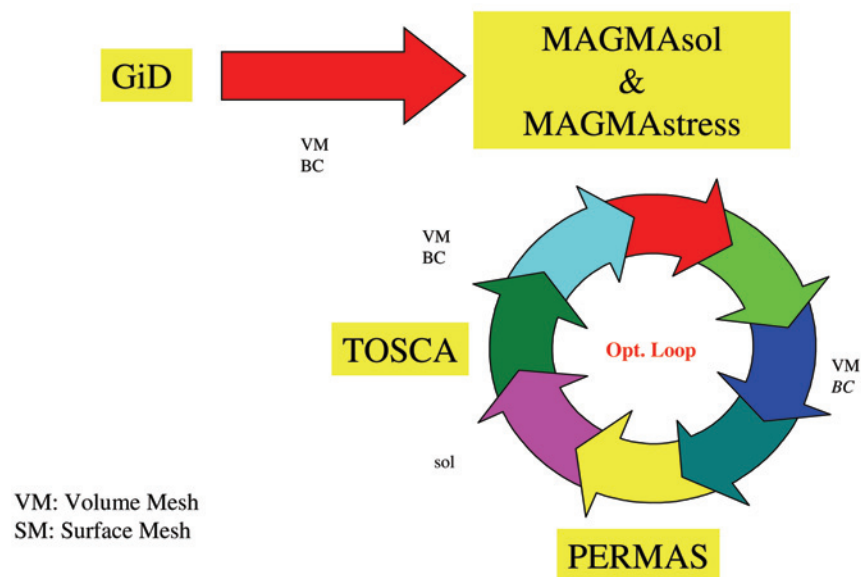


Abbildung 18

Prozesskette für Shapeoptimierung mit TOSCA, PERMAS und MAGMASoft, Variante 2.

Wie in Abbildung 16 gezeigt, kann DDFEM auch Pro/Mechanica-Outputdateien lesen. Dazu wird die im Projekt entwickelte Schnittstelle .fnf zu .in verwendet.

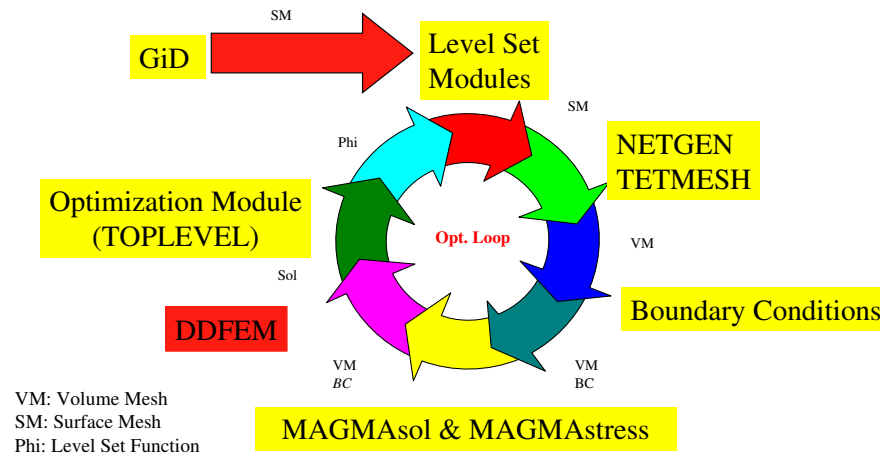


Abbildung 19

Prozesskette für Topologieoptimierung mit TopLevel, DDFEM und MAGMASoft.

6.1.2 Optimierung mit TopLevel, DDFEM und MAGMASoft

Die Topologieoptimierung mit TopLevel ist in Abbildung 19 graphisch dargestellt. Ausgangspunkt der Optimierung ist ein mit GiD generiertes Oberflächennetz mit einer Beschreibung der Randbedingungen. Das Initialisierungsmodul von LevelDict transformiert das Oberflächennetz in eine Level-Set Beschreibung der Struktur (.phi, Binärdatei), die später Grundlage der Veränderung der Topologie ist. Nachdem mit einem Netzgenerator (z.B. NETGEN oder TetMesh) ein Volumennetz erzeugt wurde, werden die Randbedingungen automatisch auf dieses neue FE-Netz übertragen. Wenn Eigenspannungen und -dehnungen berücksichtigt werden sollen, wird eine MAGMASoft-Rechnung gestartet und die Ergebnisse dieser Rechnung werden wie oben für PERMAS beschrieben in den DDFEM-Input bzw. -Output integriert. Die Gesamtergebnisse der Strukturanalyse werden benutzt, um die Struktur auf Basis der Level-Set Funktion zu verändern. Das Contouring-Modul von LevelDict generiert eine neue Oberflächenbeschreibung im .stl-Format, womit die Optimierungsschleife geschlossen wird. Die Grundlagen der Topologieoptimierung mit TopLevel sind in Abschnitt 5 beschrieben. Details sind in [22] zu finden.

6.2 GiD-DDFEM Schnittstelle

Zur Generierung von FE-Modellen im DDFEM Input-Format mit dem FE-Preprozessor GiD wurde am ITWM eine spezielle Schnittstelle entwickelt. In den folgenden Abschnitten wird die Bedienung der Schnittstelle im Detail erläutert.

6.2.1 Geometrie

Zunächst wird in GiD eine CAD-Geometriebeschreibung eingelesen (z.B. .iges). Dabei können verschiedene Parameter wie die Importtoleranz eingestellt werden. Enthält die eingelesene Geometrie noch keine Volumenbeschreibung, so müssen aus den gegebenen Flächen die Volumen konstruiert werden (vgl. Abbildung 20). Alternativ kann eine Geometrie direkt in GiD konstruiert werden.

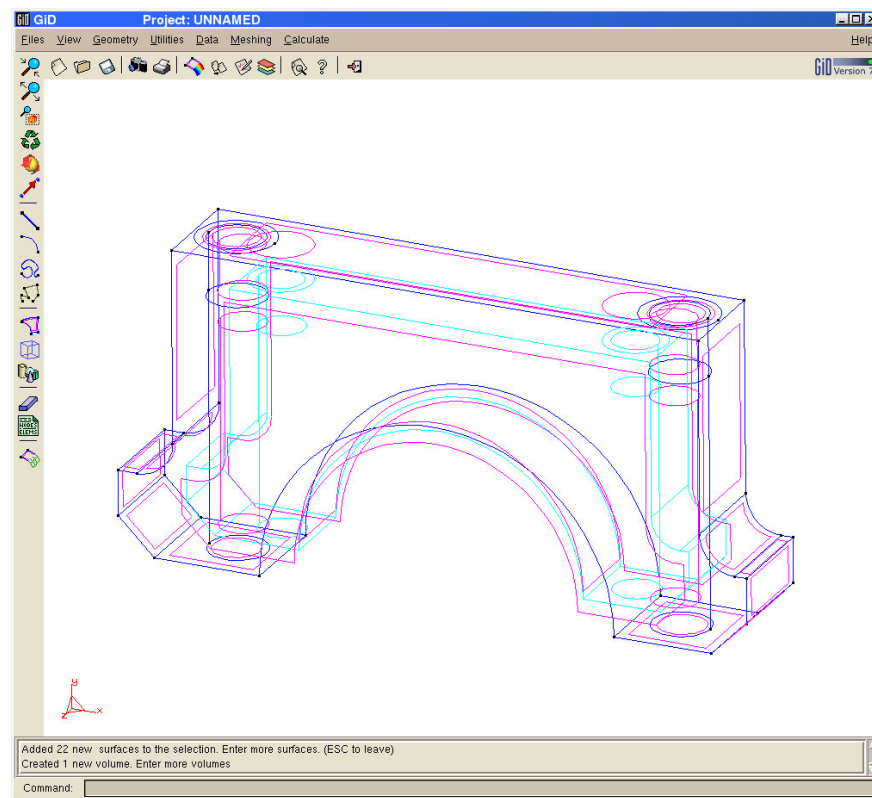


Abbildung 20

Darstellung von CAD-Daten in GiD: blau: Kanten, rot: Flächen, türkis: Volumen.

6.2.2 Lagerung und Belastung

Eine Strukturanalyse ist nur sinnvoll, wenn das Bauteil Belastungen unterworfen ist. Des weiteren muss es so gelagert sein, dass Starrkörperverschiebungen in jede Koordinatenrichtung und Starrkörperrotationen um die drei Achsen ausgeschlossen sind. Andernfalls ist die Berechnung nicht möglich, da das Problem singulär wäre und man ohne zusätzliche Annahmen keine oder sinnlose Lösungen erhalten würde. Die Lagerungen der Struktur können direkt

an geometrischen Elementen, wie z.B. einzelnen Punkten, auf Kanten oder auf Flächen (vgl. Abbildung 21), definiert werden. Dabei kann jeweils die Verschiebung in x-, y- und z-Richtung vorgeschrieben werden. Ist das Bauteil an einer Stelle fixiert, so ist die Verschiebung dort gleich Null.

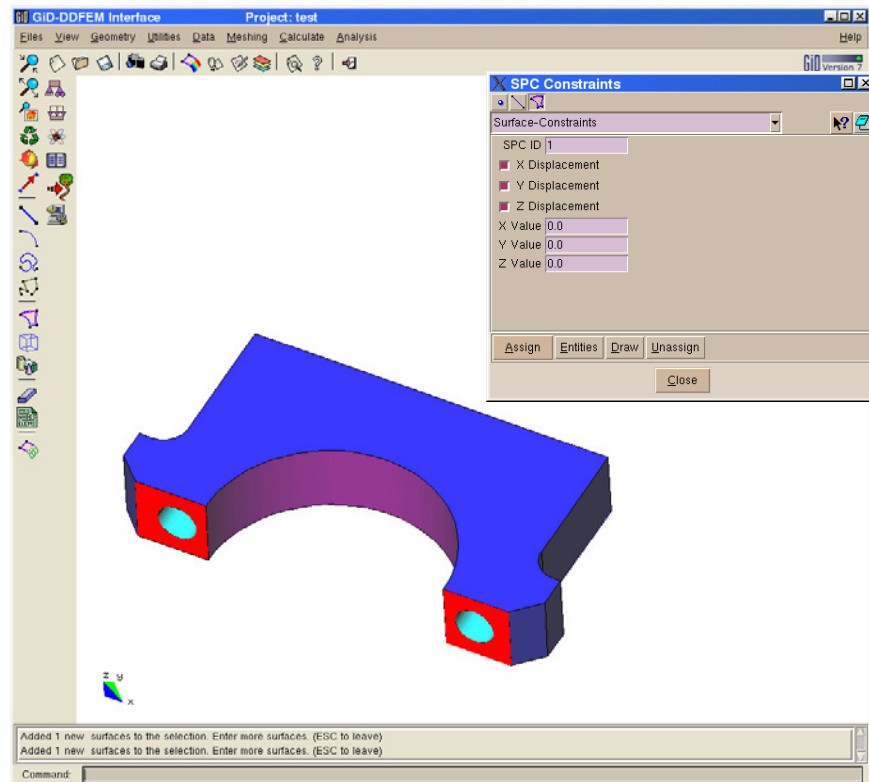


Abbildung 21

Zuweisung von Lagerungen. Selektierte Flächen sind rot markiert.

Im Folgenden wird beschrieben, wie mit GiD Belastungen definiert werden können.

Punktlast: Der einfachste Belastungsfall ist der, bei dem eine Kraft in einem Punkt angreift. Dieser Fall tritt in der Realität nicht auf, sondern ist eine Idealisierung für eine stark konzentrierte Kraft. Da ein Punkt keine Fläche hat, erzeugt eine hier angreifende Kraft theoretisch eine unendlich große Normalspannung. Aufgrund dieser Verfälschung der Ergebnisse sollte man Punktlasten vermeiden und statt dessen Belastungen auf Kanten und Flächen vorschreiben.

Kräfte und Belastungen werden für alle drei Koordinatenrichtungen nach

folgender allgemein gültiger mathematischer Beschreibung definiert: Zunächst wird für den Verlauf der Kraft auf einer Fläche eine Funktion ausgewählt, die anschließend durch Koeffizienten beschrieben wird. Es stehen folgende Funktionen zur Auswahl:

- konstant: $p_0 = c_0$
- linear: $p_1 = c_0 + c_1x + c_2y + c_3z$
- bilinear: $q_1 = c_0 + c_1x + c_2y + c_3z + c_4xy + c_5xz + c_6yz$
- quadratisch: $p_2 = c_0 + c_1xy + c_2xz + c_3yz + c_4x^2 + c_5y^2 + c_6z^2$
- Sinus: $f_s(x) = c_0 + c_1\sin(x)$
- Cosinus: $f_c(x) = c_0 + c_1\cos(x)$

Für alle Koeffizienten c_i stehen verschiedene Einheiten zur Verfügung.

Kantenlast: In der GiD-DDFEM-Schnittstelle sind Kantenlasten noch nicht definiert.

Flächenlast: Bei Flächenlasten wird zwischen Belastung in Richtung der Flächennormalen (normal-surface-load), Belastung in einer beliebigen Richtung (surface-pressure-load) und Lochleibungslast (bearing-pressure-load) unterschieden. Im ersten Fall wirkt die Last immer in Richtung der Flächennormalen, weswegen die Angabe einer Richtung entfällt. Ansonsten wird die Last genau wie eine Punktlast beschrieben. Wirkt die Kraft entlang der äußeren Normalen (Zug), so hat sie negatives Vorzeichen, wirkt sie entlang der inneren Normalen (Druck), so ist sie positiv.

Für die Belastung in beliebiger Richtung ist die Beschreibung mit der für Punktlasten identisch. Befindet sich ein starrer Bolzen (Achse, Niet, Stift, ...) in einer Bohrung, so übt er eine Kraft auf den umgebenden Zylinder aus. Dies wird von der Lochleibungslast approximiert. Es wird angenommen, dass sich der Druck kosinusförmig auf die Zylindermantelfläche verteilt:

$$p = \frac{2F\alpha \cos(at)}{A}, \quad -\varphi_{max} \leq t \leq \varphi_{max}.$$

Dabei ist

p der Druck,

F die Kraft, die vom Bolzen auf den Zylinder ausgeübt wird,

t Laufvariable,

A die Fläche, auf die die Kraft wirkt und

α und a winkelabhängige Koeffizienten.

Der Benutzer muss nur die Kraft F in den drei Koordinatenrichtungen, φ_{max} und die Größe der belasteten Fläche A angeben sowie die geometrische Fläche auswählen. Wenn die geometrische Fläche ein Kreisring ist, kann GiD die belastete Fläche A automatisch berechnen, d.h. in diesem Fall muss A nicht angegeben werden.

Momentenbedingung: Momentenbedingungen auf einer Fläche werden über die Werte des Moments um die drei Koordinatenachsen und den Punkt, der die neutrale Achse der Fläche definiert, bestimmt.

Volumenkraft: Volumenkräfte sind bisher in Form von Beschleunigungsvektoren in Richtung der Koordinatenachsen implementiert. Wird eine Volumenkraft definiert, so wirkt sie auf das gesamte Bauteil.

6.2.3 Mengen von Knoten (NSets)

Die Schnittstelle erlaubt die Definition von NSets. Dabei werden eine oder mehrere Flächen ausgewählt. Alle Knoten eines später erzeugten FE-Netzes, die auf diesen Flächen liegen, werden unter dem Namen des NSets in die DDFEM-Inputdatei geschrieben. Die Anwendung von NSets liegt z.B. in der Spezifizierung von freien bzw. fixierten Rändern in der Shapeoptimierung.

6.2.4 Material

Bislang können nur isotrope linear elastische Materialien behandelt werden. Sie werden durch die Parameter E-Modul (Young's modulus), Querkontraktionszahl (Poisson ratio) und Dichte (density) beschrieben. Die Einheiten der Beschreibung sind frei wählbar. Schon vorhandene Materialien können aus einer internen Datenbank ausgewählt werden, neue Materialien können definiert werden oder Materialdaten können aus einer externen Datenbank importiert werden.

6.2.5 Vernetzung und Ergebnisse

Parameter für Vernetzung: Die Feinheit und die Qualität des FE-Netzes können über verschiedene Parameter beeinflusst werden. So können der kordale Fehler (ein Maß für die Genauigkeit der Approximation der Geometrie) sowie minimale und maximale Vernetzungsgröße vorgegeben werden. Für die Feinheit des Netzes ist die Größe der Elemente entscheidend, die auch manuell eingegeben werden kann.

Export der Ergebnisse: Der letzte Schritt besteht in der Generierung einer Berechnungsdatei für DDFEM (vgl. Abbildung 22). Die Schnittstelle schreibt eine .in-Datei, die das Volumennetz und die Randbedingungen enthält. Die Randbedingungen werden von den geometrischen Größen (Punkte, Flächen, Volumen), auf denen sie definiert sind, auf Knoten und Elemente des FE-Netzes übertragen.

Maßeinheiten: Die DDFEM-Inputdatei kann in verschiedenen Maßeinheiten geschrieben werden, die über ein Dialogfenster bestimmt werden können. Die

Koordinaten der Knoten können dabei in einer anderen Einheit gewählt werden als die Belastungen (z.B. cm und N/mm^2).

Bemerkung 1 Neben der GiD-DDFEM Schnittstelle wurde auch eine Schnittstelle von GiD zu PERMAS entwickelt. Da beide Schnittstellen fast identisch sind, ist hier nur die GiD-DDFEM Schnittstelle beschrieben.

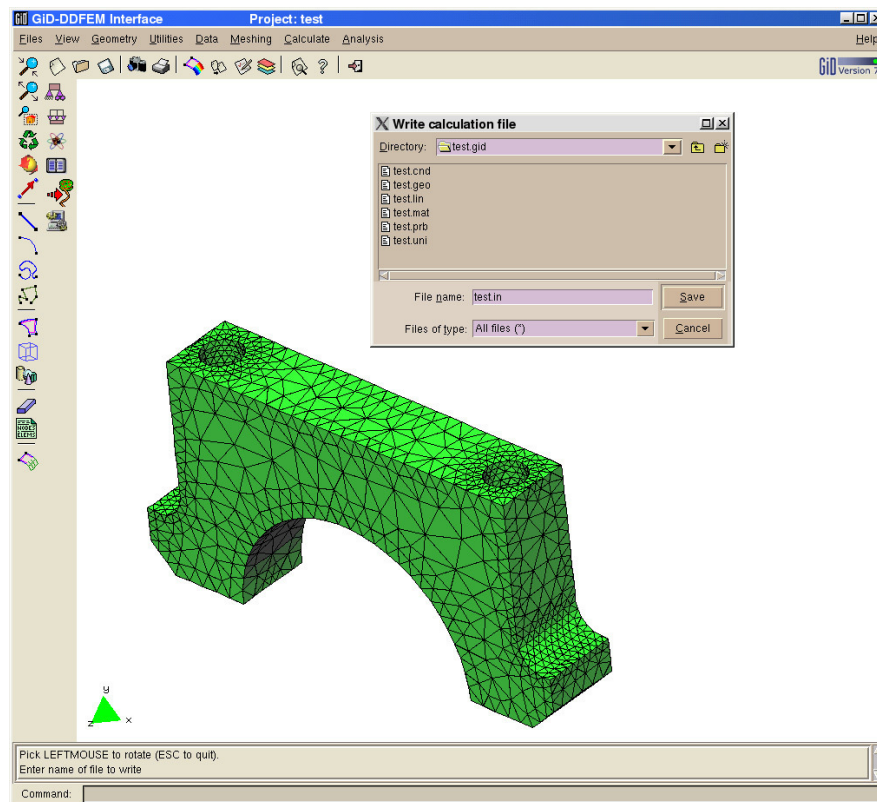


Abbildung 22

Export der Berechnungsdatei für den Solver

7 Zusammenfassung

Das Ziel des Projektes war es, Gießereien ein Simulationswerkzeug an die Hand zu geben, um frühzeitig gießprozesstechnische Restriktionen bei einer optimalen Bauteilkonstruktion mit zu berücksichtigen. Im Projektverlauf wurde das Hauptziel des Aufbaues einer durchgängigen Prozesskette zur integrierten Strukturoptimierung von Gussbauteilen erreicht. Hieraus ergab sich eine klare Übersicht der Defizite bzw. der Vor- und Nachteile heute einsatzfähiger Software zur Strukturoptimierung von Gussbauteilen. Es zeigte sich dabei, dass eine durchgängige Prozesskette realisierbar ist, dass aber der Einsatz dieser Simulationskette nicht vollautomatisch möglich ist, sondern dass in vielen Fällen manuelle Eingriffe von Experten notwendig sind. Gemeinsam mit den führenden Softwareanbietern (FE Design und MAGMA) konnten kleine, hilfreiche Modifikationen erzielt werden, die jetzt schon bzgl. geometrischer gießtechnischer Restriktionen die Optimierung unterstützen. Allerdings zeigten die Analysen und Studien im Projekt, dass es prinzipiell neuer Konzepte bedarf, um zu einem effizienten und automatischen, d.h. alltagstauglichen Auslegungswerkzeug zu gelangen. Folgende Gründe wurden im Projekt identifiziert:

- Hohe Anforderungen an die Rechenzeiten bei der Gießsimulation und Strukturmechaniksimulation im Optimierungszyklus erfordern den Einsatz eines Parallelrechners, der für Gießereien nicht finanzierbar ist.
- Die existierenden Softwarepakete und Schnittstellen arbeiten noch zu unzuverlässig, so dass ein automatisch gesteuerter Einsatz nicht möglich ist. Eine durchgängige automatische Topologie- und anschließende Gestaltoptimierung ist derzeit nicht möglich.
- Die Gießereien haben wenig Know-How in der strukturmechanischen Auslegung und Dimensionierung und möchten dies als Dienstleistung oder als Black-Box nutzen.

Aus diesen Gründen wurde die Projektplanung dahingehend angepasst, dass im Rahmen des Projektes eine prototypische Softwarelösung geschaffen wurde, die es den Gießereien erlaubt, die Vor- und Nachbereitungsschritte der Strukturoptimierung beispielhaft selbst durchzuführen und die notwendigen aufwendigen Bearbeitungen und Simulationsrechnungen am Fraunhofer ITWM durchführen zu lassen. Diese Lösung ist in dem Sinne prototypisch, da noch viele Arbeiten am Fraunhofer ITWM durch Experten durchzuführen sind. Somit sind die Bearbeitungszeiten für einen routinemäßigen Einsatz noch zu hoch und daher betriebswirtschaftlich nur in Ausnahmefällen sinnvoll. Den Gießereien steht ein beispielhaftes Instrumentarium zur Verfügung, um neue Bauteilklassen und damit Absatzmärkte zu erschließen. Allerdings wird dieses neue Werkzeug aktuell nur modellhaft für ausgewählte Bauteile eingesetzt, da der Aufwand

und damit die Kosten für einen täglichen Einsatz zu hoch sind.

Die Projektergebnisse zeigen darüber hinaus, dass der Flaschenhals, um zu einer effizienten und automatischen Auslegungssoftware zu gelangen, nicht die einzelnen Softwarekomponenten bzw. Optimierungstools sind, sondern eine konsistente Verknüpfung von Konstruktion, Vernetzung, FE-Berechnung und Optimierung. Weiterhin sind die Berechnungszeiten durch angepasste moderne Algorithmen deutlich (um Faktor 100) zu reduzieren. Dies ist nur durch eine konzeptionell einheitliche Berechnungsmethodik erreichbar und erfordert neuartige Methoden und einiges an Entwicklungsarbeiten. Erste Vorarbeiten sind am Fraunhofer ITWM in Form von Diplom- und Doktorarbeiten ([22], [23]) durchgeführt worden. Die Umsetzung eines solchen Strukturoptimierungswerkzeugs ist dann primär für die Gießereiindustrie von Nutzen, eröffnet aber auch für andere Branchen (z.B. Maschinen- und Anlagenbau, Fahrzeugbau, kunststoffverarbeitende Industrie) ganz neue Perspektiven hinsichtlich der Bauteilkonstruktion.

Literatur

- [1] G. Allaire, F. Jouve und A.-M. Toader. Structural optimization using sensitivity analysis and a level-set method.
- [2] G. Allaire, R. Jouve, and H. Maillot. Topology optimization for minimum stress design with the homogenization method.
- [3] G. Allaire, F. Jouve, and A.-M. Toader. A level-set method for shape optimization.
- [4] H. Andrä, J. Linn, I. Matei, I. Shklyar, A. K. Vaikuntam und A. Wiegmann. Spezifische Strukturoptimierungsverfahren für Gießereien. Symposium "Simulation in der Produkt- und Prozessentwicklung", 5.-7. November 2003, Bremen.
- [5] H. Baier, C. Seeßelberg, and B. Specht. Optimierung in der Strukturmechanik. Friedr. Vieweg & Sohn Verlag mbH, Braunschweig/Wiesbaden, 1994.
- [6] F.-J. Barthold. Zur Kontinuumsmechanik inverser Geometrie Probleme. Braunschweiger Schriften zur Mechanik Nr. 44-2002.
- [7] S. Garreau, P. Guillaume und M. Masmoudi. The topological sensitivity for linear isotropic elasticity.
- [8] S. Garreau, P. Guillaume und M. Masmoudi. The topological asymptotic for PDE systems: the elasticity case.
- [9] J. H. Hattel, T. K. Jacobsen and P.N. Hansen. Real-time simulation of thermal stresses and creep in plates subjected to transient heat input.
- [10] Hector Flores Cantu. Modeling and Optimizing Solidification Processes. Master Thesis. University of Kaiserslautern. Department of Mathematics. September 2004.
- [11] G. Iancu. Spannungskonzentrationsminimierung dreidimensionaler elastischer Kontinua mit der FEM. 1990.
- [12] A. Lencus and O. M. Querin. Optimisation of Structures Subject to Multiple Load Cases Using Biological Growth Laws. May 1998.
- [13] T. Lewinski and J. Sokolowski. Energy change due to the appearance of cavities in elastic solids.
- [14] O. M. Querin, G. P. Steven, Y. M. Xie, and V. Young. 3D Bi-directional Evolutionary Structural Optimisation (BESO). July 1998.
- [15] G. I. N. Rozvany. Stress ratio and compliance based methods in topology optimization - a critical review. Struct Multidisc Optim 21, 109-119. Springer-Verlag 2001.
- [16] A. Schumacher. Topologieoptimierung von Bauteilstrukturen unter Verwendung von Lochpositionierungskriterien. Universität-Gesamthochschule-Siegen, 1995.
- [17] J. A. Sethian. Level Set Methods and Fast Marching Methods. Cambridge University Press 1999.
- [18] J. A. Sethian und A. Wiegmann. Structural boundary design via level set and immersed interface methods.

- [19] J. Sokolowski and A. Zochowski. Topological derivatives for elliptic problems.
- [20] J. Sokolowski and A. Zochowski. On topological derivative in shape optimization.
- [21] J. C. Sturm, MAGMA Gießereitechnologie GmbH, Aachen, Deutschland. Die Prozess-Entwicklungskette: Nutzung von Eigenschaftsvorhersagen für Gusseisenwerkstoffe für innovative Bauteilkonstruktionen.
- [22] E. Teichmann. Numerical Solution of Three-Dimensional Topology Optimization Problems in Elasticity. Diploma Thesis. University of Kaiserslautern. Department of Mathematics. August 2004.
- [23] I. Matei, Three-Dimensional Topology Optimization of Casting Parts under Consideration of the Casting Process. PhD Thesis, in preparation. University of Kaiserslautern. Department of Mechanical Engineering.
- [24] GiD – The personal pre and post processor. <http://gid.cimne.com/>.
- [25] MAGMASoft. Committed to Casting Excellence. <http://www.magmasoft.de/>.
- [26] MEDINA. Universeller FE Pre- und Postprozessor. <http://www.c3pdm.com/des/products/medina/>.
- [27] NETGEN - automatic mesh generator. <http://www.hpfem.jku.at/netgen/>.
- [28] PERMAS. The PERMAS Finite Element Software. <http://www.intes.de/>.
- [29] Pro/Mechanica Wildfire. Konstruieren ohne Kompromisse. http://www.ptc.com/products/business_solutions.htm.
- [30] TetMesh-GHS3D V3.1 The fast, reliable, high quality tetrahedral mesh generator and optimiser; White paper. <http://www.simulog.fr/mesh>.
- [31] TOSCA. http://www.fe-design.de/software/index_d.html.

A Benchmark-Probleme

A.1 Spritzgießmaschine von Römheld & Moelle

Die Firma Römheld&Moelle brachte die in Abbildung 23 dargestellte Spritzgießmaschine mit einer Schließkraft von 5.500 kN als Benchmarkproblem in das Projekt ein. Die Bauteildaten wurden dem ITWM im Catia V4-Format zur Verfügung gestellt.

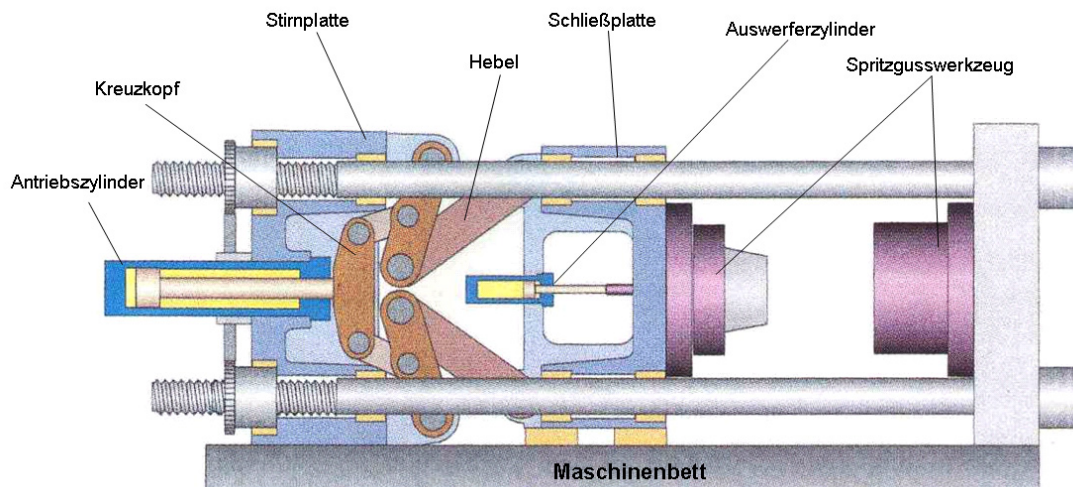


Abbildung 23

Spritzgießmaschine mit einer Schließkraft von 5.500 kN.

Es wurden eine Festigkeitsberechnung für die Nutzungsphase und eine Optimierung (Topologie und Form) bezüglich der Nutzungsphase durchgeführt. Da das elastische Verhalten der Hebel nicht bekannt war, wurde die Spritzgießmaschine geteilt. Die Stirn- und die Schließplatte wurden jeweils als eigene Bauteile betrachtet. Kontaktflächen und Reibkoeffizienten wurden nicht berücksichtigt, die entsprechenden Flächen wurden einfach als fixiert angenommen.

Als Material für Schließ- und Stirnplatte wurde die Legierung EN-GJS-400-15 mit den in Tabelle 1 angegebenen mechanischen Eigenschaften verwendet. Der Elastizitätsmodul ist $E = 169 \text{ GPa}$ und die Querkontraktionszahl ist $\nu = 0,275$. Weiterhin wurde vom Endkunden ein Sicherheitsfaktor ≥ 3 verlangt.

Zunächst wurden die Berechnungen mit Medina als FE-Preprozessor und PERMAS als FE-Löser durchgeführt. Dazu wurde die Krafteinleitung mit Hilfe von

Tabelle 1

Mechanische Eigenschaften der Legierung EN-GJS-400-15

Werkstoff- bezeichnung	Wanddicke t [mm]	Zugfestigkeit R_m [N/mm ²], min	0,2% Dehngrenze $R_{P0,2}$, min	Dehnung A [%], min
EN-GJS-400-U	$t \leq 30$	400	250	15
	$30 < t \leq 60$	390	250	14
	$60 < t \leq 200$	370	240	11

sehr steifen Halbzylindern ($E = 50.000 \text{ GPa}$; $\nu = 0,3$) simuliert. Außerdem wurden spezielle Starrkörper-Elemente (RBE2, RBE3) verwendet. Diese Ansätze waren jedoch zu ungenau, insbesondere da nicht klar war, welche Materialparameter für die Halbzylinder zu wählen waren. Deswegen und wegen sehr langer Rechenzeiten wurde der parallele iterative FE-Löser DDFEM (ITWM-Eigenentwicklung) erweitert, so dass Lochleibungs-Randbedingungen (vgl. Abschnitt 6.2.2, Flächenlast) behandelt werden konnten. Vergleiche der Ergebnisse ergaben, dass DDFEM bei geringerer Rechenzeit genauere Ergebnisse liefert. Alle unten gezeigten Ergebnisse wurden mit DDFEM berechnet.

Zuerst wurde eine Strukturanalyse der Bauteile durchgeführt. Dabei wurde die Symmetrie der Strukturen nicht ausgenutzt. Die Optimierungsrechnungen wurden dagegen jeweils auf dem halben Bauraum durchgeführt (Symmetrie). Regionen, die im Verlauf der Optimierung nicht verändert werden durften, wurden als separate Volumen definiert.

A.1.1 Schließplatte

Die Lagerungen und Belastungen der Schließplatte für die Festigkeitsberechnung sind in den Abbildungen 24 und 25 dargestellt. Hellblaue Flächen sind jeweils fixiert. Für die Berechnung des Originalbauteils mit Medina und PERMAS wurden verschiedene FE-Netze verwendet: ein Netz aus 1.685.937 Tetraeder-Elementen mit je 10 Knoten (Tet10) und 2.478.882 Knoten und ein Netz aus 1.685.937 Tetraeder-Elementen mit je vier Knoten (Tet4) und 329.619 Knoten. Der Bauraum der Schließplatte wurde aus Symmetriegründen geteilt und mit 569.165 Tet4-Elementen und 108.954 Knoten vernetzt. Die Lagerungen des Bauraums sind in Abbildung 33 (links) gezeigt.

Bei der Optimierungsrechnung der Schließplatte war die Minimierung der Nachgiebigkeit als Zielfunktion gegeben. Es mussten folgende (gießtechnische) Nebenbedingungen beachtet werden:

- Minimale Wandstärke: 30 mm - 60 mm.
- Maximale Wandstärke: 60 mm - 100 mm.
- Auszugsrichtung (vgl. Abbildung 26).
- Erhaltung der Symmetrie im Verlauf der Optimierung.
- Volumenvorgabe.

Die Wandstärken wurden variiert, um die Entstehung von Rippen zu begünstigen. Auf Kundenwunsch wurden Streben zwischen den Zylindern manuell nachkonstruiert. Dabei betrug die Höhe der Streben nur noch 80 % der Originalhöhe. Die Dicke der Streben wurde um 50 % reduziert. Im Fall der Nachkonstruktion von Rippen wurde die Rechnung ohne Wandstärkerestriktionen durchgeführt.

Es wurden verschiedene Volumenvorgaben ausprobiert, schließlich aber nur die Ergebnisse für 15 % und für 5 % des Bauraumvolumens betrachtet. Der 5 %-Fall wurde berechnet, weil bei 15 % Volumenreduktion und gleichzeitiger Fixierung der Dicke der Bodenplatte bei 90 mm das Volumen des Design-Bereichs zu klein war, um eine sinnvolle Optimallösung zu berechnen. Drei Optimierungsvarianten der Schließplatte, die weiter verglichen werden, sind in Tabelle 2 dargestellt.

Tabelle 2

Optimierungsvarianten für Schließplatte

	Variante 1	Variante 2	Variante 3
Volumenreduzierung um	15 %	5 %	15 %
Fixierte Volumen	228,4 dm^3	228,4 dm^3	187,4 dm^3
Dicke der Bodenplatte	90 mm	90 mm	60 mm

Insgesamt wurden fünf Lastfälle berechnet (vgl. Abbildung 25). Für die drei weiter betrachteten Fälle sind die optimierten Strukturen in Abbildung 27 präsentiert. Bei allen drei Varianten kann die Ausbildung von Rippen beobachtet werden.

Die gezeigten Optimierungsergebnisse (vgl. z.B. Abbildung 28) enthalten nicht nur "harte", sondern auch "mittelweiche" und "weiche" Elemente. Sie wurden nicht nachkonstruiert und sind daher als "Designvorschlag" zu verstehen. Es ist allerdings eine Nachbearbeitung mit TOSCA.smooth möglich, die Isoflächen konstanter Dichte extrahiert (vgl. Abbildung 29). Leider kann dieser Prozess in Abhängigkeit von der Wahl der Isofläche die Optimierungsergebnisse stark verfälschen.

Für alle optimierten Varianten sind die Spannungen und Verschiebungen höher als beim Originalbauteil. Schon eine Volumenreduktion um 5 % würde die Spannungen um ca. 10 % erhöhen (vgl. Tabelle 30).

Da mit der Bodenplatte der Teil, der den größten Einfluss auf die Minimierung der Zielfunktion hat, fixiert ist, besitzt die Schließplatte nur geringes Optimierungspotenzial.

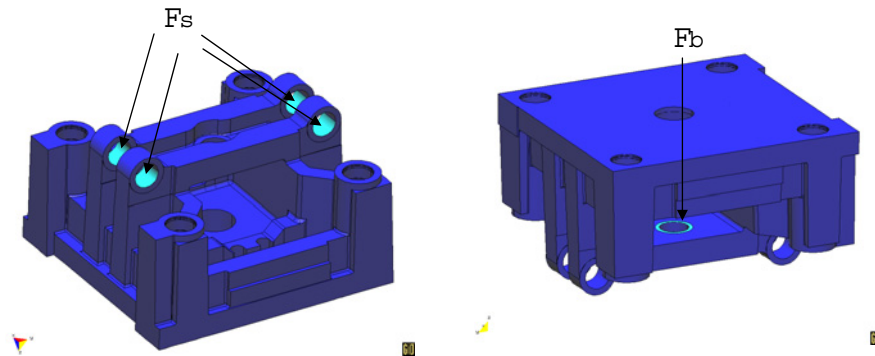


Abbildung 24

Schließplatte: Originalgeometrie und Belastung; Schließkraft $F_s = 5.500$ kN, Brückenkraft $F_b = 113$ kN.

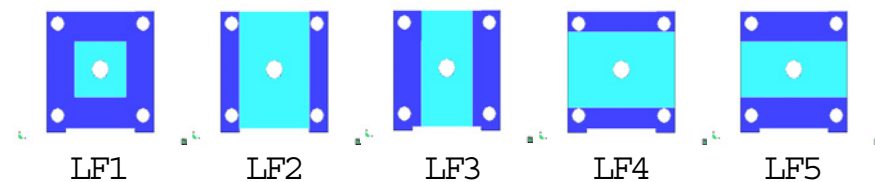


Abbildung 25

Schließplatte: 5 Varianten der Lagerung der Bodenplatte, Fixierung in z-Richtung (hellblaue Flächen sind fixiert).

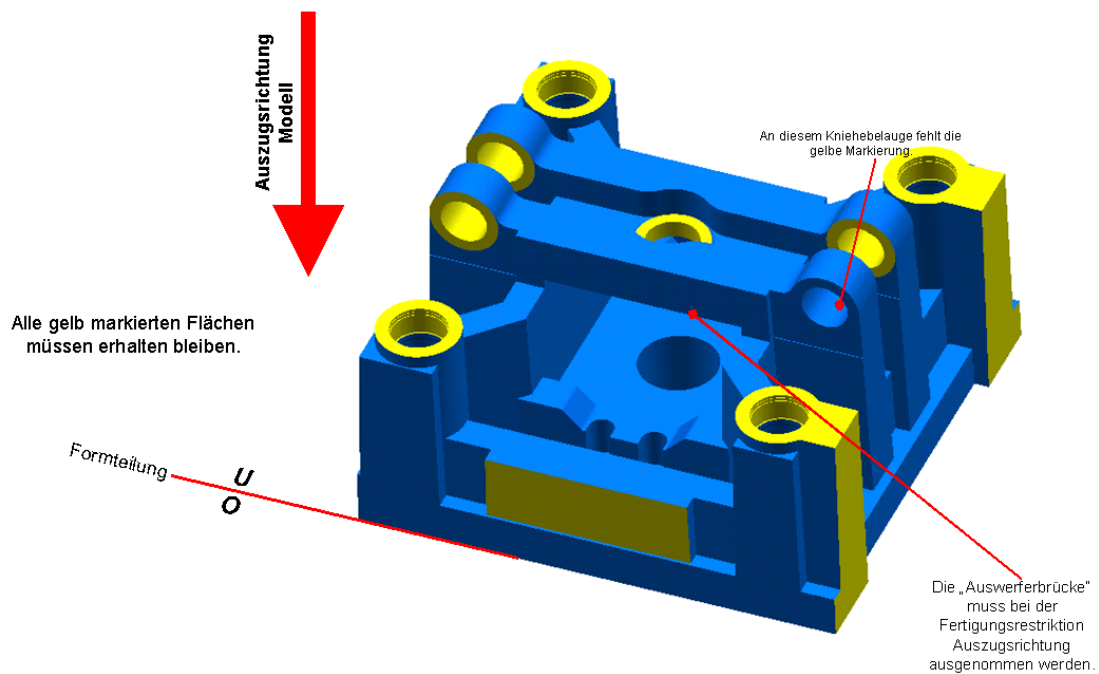


Abbildung 26

Schließplatte: Auszugsrichtung.

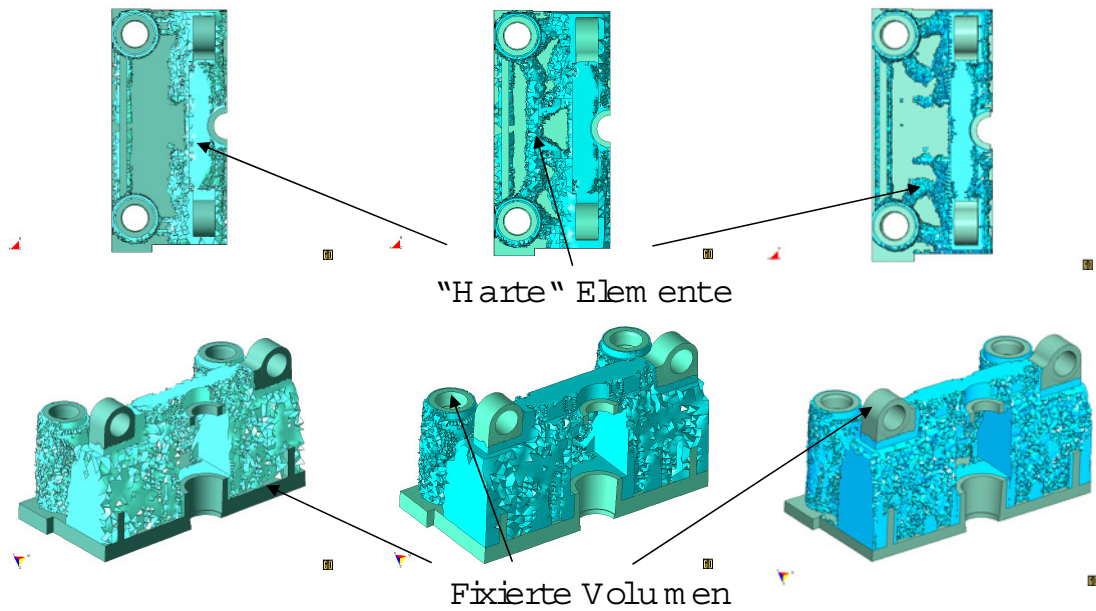


Abbildung 27 Schließplatte: Optimierte Variante 1, 2 und 3 (v.l.n.r.).

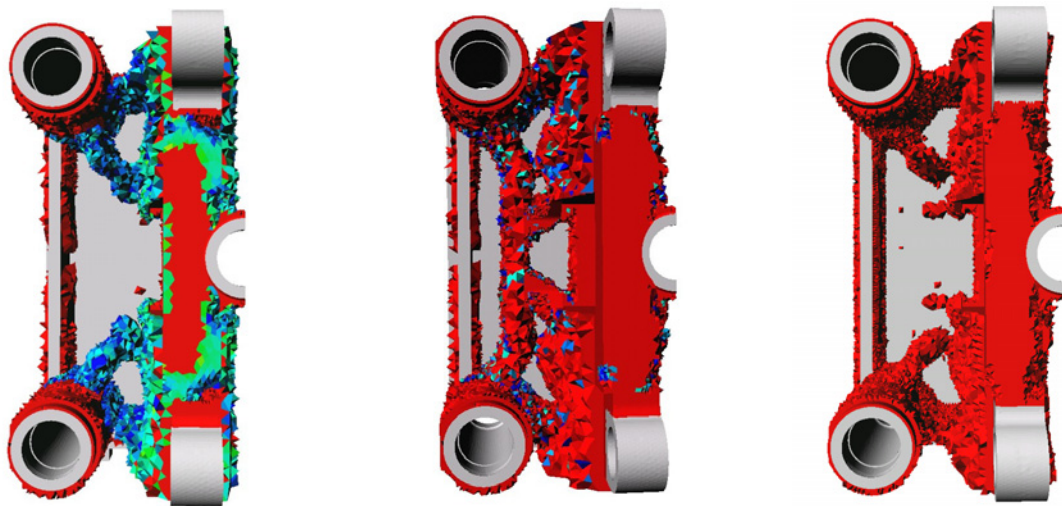


Abbildung 28 Schließplatte: Vergleichsansicht Variante 1 (7. Iteration), Variante 2 (9. Iteration) und Variante 3 (10. Iteration).
Rot: "harte" Elemente, grün: "mittelweiche" Elemente, blau: "weiche" Elemente.

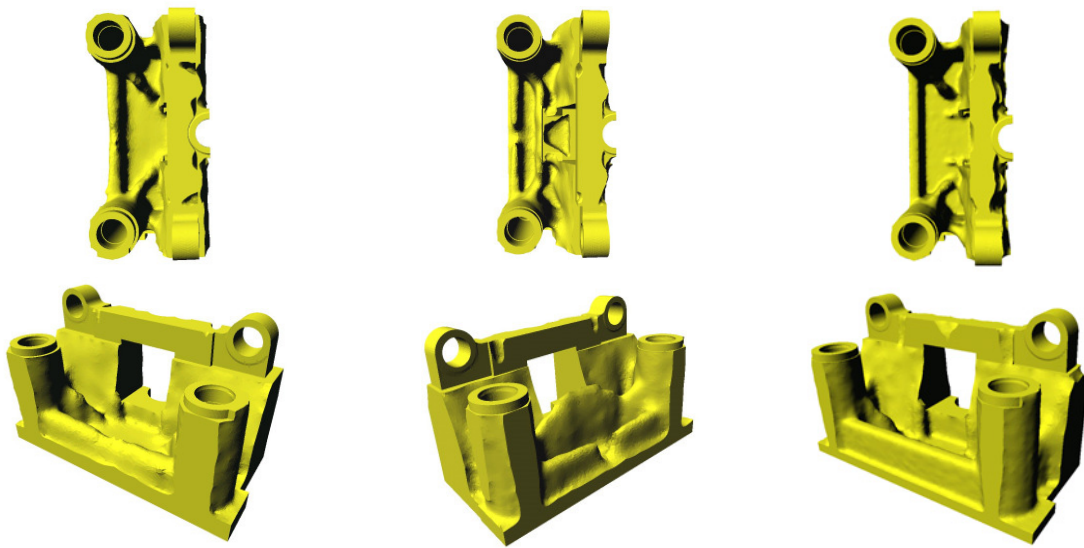


Abbildung 29

Schließplatte: Vergleichsansicht Variante 1 (7. Iteration, Isofläche mit Dichte $\rho = 0,3$; Volumen: $610,8 \text{ dm}^3 \doteq 32,98 \%$ Volumenreduktion. Variante 2 (9. Iteration, Isofläche mit Dichte $\rho = 0,7$; Volumen: $614,4 \text{ dm}^3 \doteq 32,59 \%$ Volumenreduktion) und Variante 3 (10. Iteration, Isofläche mit Dichte $\rho = 0,7$; Volumen: $524,5 \text{ dm}^3 \doteq 42,45 \%$ Volumenreduktion).

		Original	Bauraum	Variante1	Variante2	Variante3
Volumen [dm ³]		594,8	911,4	518,9*	565,4**	490,0**
Abweichung [%]		x	53,2	-12,8	-4,9	-17,6
Verschiebung [mm]	LF1	0,2051	0,1878	0,2577	0,2256	0,2502
	LF2	0,1510	0,1508	0,1794	0,1624	0,1700
	LF3	0,1511	0,1520	0,1795	0,1636	0,1706
	LF4	0,1719	0,1666	0,2122	0,1874	0,2030
	LF5	0,2007	0,1823	0,2508	0,2163	0,2397
Abweichung [%]	LF1	x	-8,45	25,64	10,01	21,99
	LF2	x	-0,17	18,80	7,57	12,56
	LF3	x	0,60	18,75	8,29	12,89
	LF4	x	-3,10	23,40	8,99	18,07
	LF5	x	-9,18	24,95	7,77	19,43
v. Mises [N/mm ²]	LF1	155,15	170,96	172,4	172,49	174,00
	LF2	150,91	169,85	170,4	170,22	170,23
	LF3	150,91	169,79	170,4	170,26	170,24
	LF4	152,59	170,58	171,4	171,24	171,22
	LF5	154,76	171,08	172,2	172,15	173,31
Abweichung [%]	LF1	x	10,19	11,10	11,18	12,15
	LF2	x	12,55	12,93	12,80	12,80
	LF3	x	12,51	12,93	12,82	12,81
	LF4	x	11,79	12,30	12,22	12,21
	LF5	x	10,55	11,28	11,24	11,99

Abbildung 30

Schließplatte: Zusammenfassung. Die Ergebnisse zeigen, dass die Schließplatte kaum Optimierungspotenzial besitzt. Geringe Materialeinsparungen von 5% würden die Verformungen um ca. 10% vergrößern. *) Isofläche mit Dichte $\rho = 0,7$. **) Isofläche mit Dichte $\rho = 0,9$.

A.1.2 Stirnplatte

Abbildung 31 zeigt die Lastfälle für die Festigkeitsberechnung der Stirnplatte. Die Werte der Kräfte sind: Schließkraft $F_s = 5.500$ kN, Zylinderkraft $F_z = 422$ kN und Querkraft $F_q = 117,5$ kN. Die Berechnungen mit Medina und PERMAS für das Originalteil wurden auf folgenden FE-Netzen durchgeführt: 1.516.618 Tetraeder-Elemente und 2.210.007 Knoten (Tet10, d.h. 10 Knoten pro Tetraeder) bzw. 298.671 Knoten (Tet4-Elemente). Das Netz für die DDFEM-Rechnung bestand aus 2.313.390 Tet4-Elementen und 451.276 Knoten. Die Lagerungen des Bauraums der Stirnplatte sind in Abbildung 33 dargestellt.

Wie bei der Schließplatte war die Minimierung der Nachgiebigkeit die Zielfunktion. Die zu beachtenden Nebenbedingungen waren:

- Minimale Wandstärke: 30 mm.
- Maximale Wandstärke: 100 mm.
- Maximale Querverschiebung der oberen Aufnahme Kreuzkopfführung: +/- 0,35 mm in y-Richtung.
- Auszugsrichtung (vgl. Abbildung 32).
- Erhaltung der Symmetrie im Verlauf der Optimierung.
- Volumenvorgabe.

Bemerkung 2 Die an die Querverschiebung der Kreuzkopfführung gestellte Bedingung wurde für das Originalteil in eine Querkraft umgerechnet (F_{q+} und F_{q-} in Abbildung 31). Die Größe der Kraft wurde so bestimmt, dass die Kraft genau die maximal zulässige Querverschiebung erzeugt. In den späteren Optimierungsschritten wurde dieselbe Kraft verwendet.

Das Volumen der Stirnplatte sollte auf 55 % des Bauraumvolumens reduziert werden. Dieser Wert stellte sich als zu hoch heraus. Deswegen wurden auch hier verschiedene Volumenvorgaben ausprobiert (vgl. Tabelle 3).

Tabelle 3

Optimierungsvarianten für Stirnplatte. Volumenangaben beziehen sich auf das Originalbauteil.

	Variante 1	Variante 2
Volumenreduzierung um	25 %	30 %
Fixierte Volumen	104,435 dm ³	104,435 dm ³

Die Optimierung der Stirnplatte lieferte positive Resultate (großes Optimierungspotenzial): Bei 30% Materialeinsparung konnten die Verformungen um ca. 20 % reduziert werden (vgl. Tabelle 37).

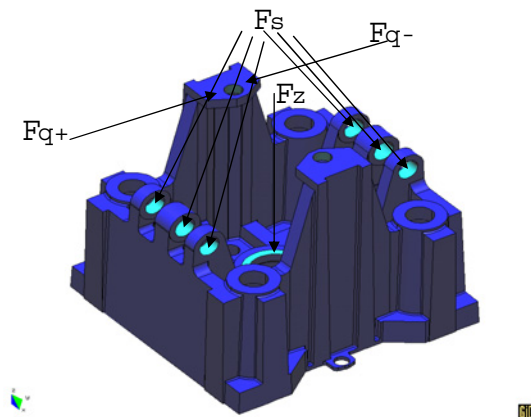


Abbildung 31

Stirnplatte: Originalgeometrie; Schließkraft $F_s = 5.500$ kN, Zylinderkraft $F_z = 422$ kN, Querkraft $F_q = 117,5$ kN.

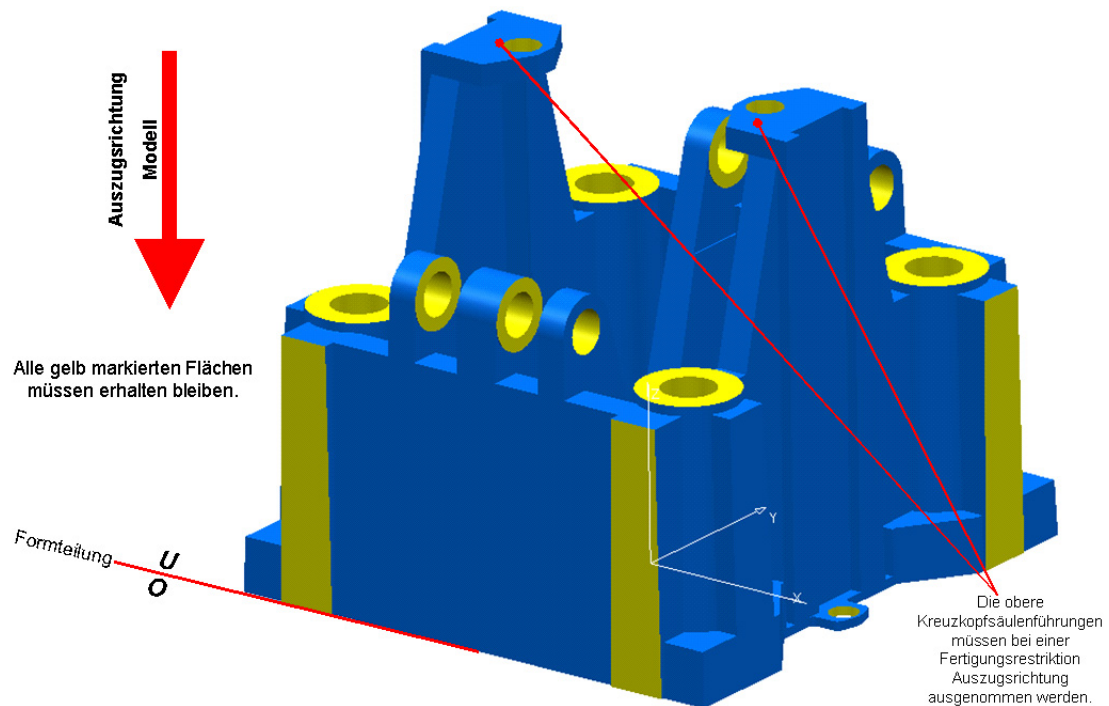


Abbildung 32

Stirnplatte: Auszugsrichtung.

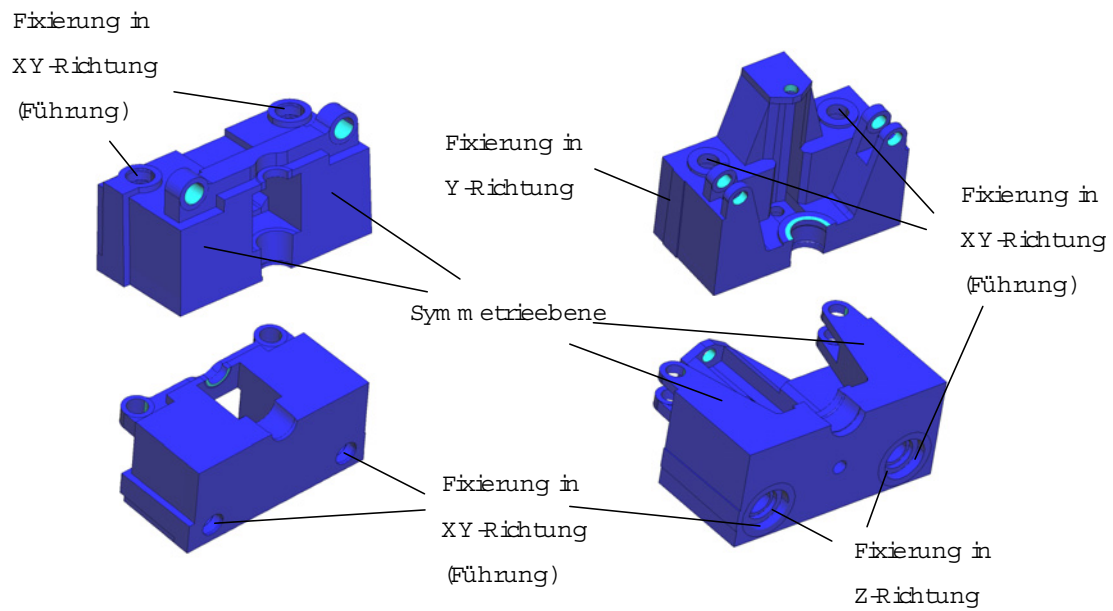


Abbildung 33 Bauraum von Schließ- und Stirnplatte: Lagerung

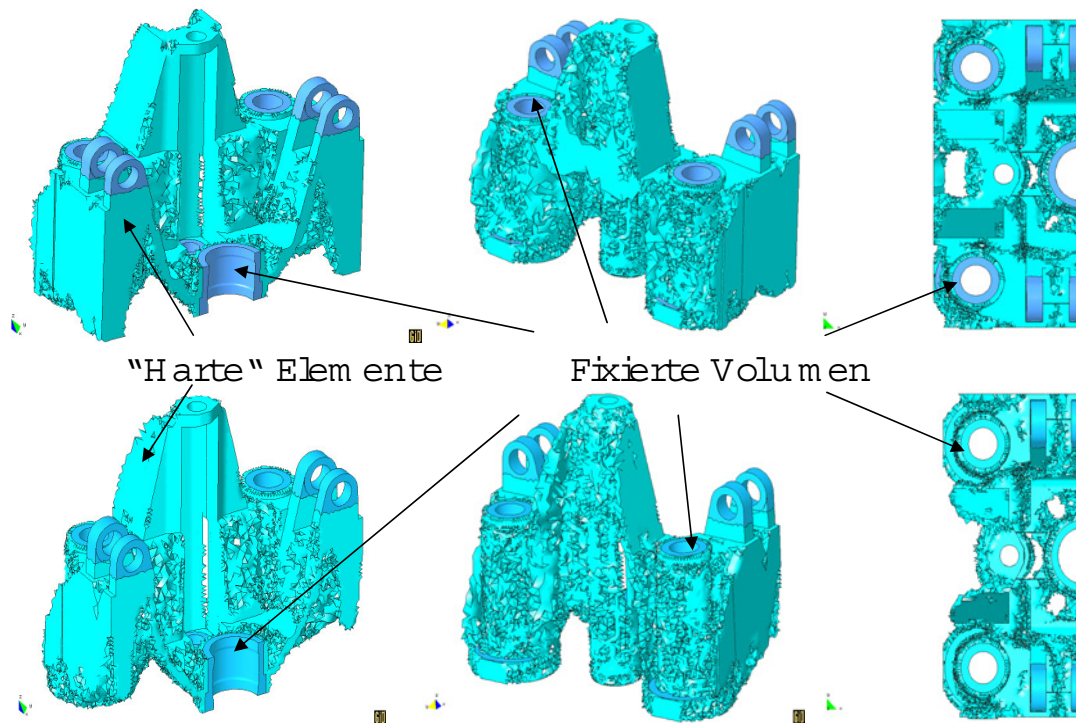


Abbildung 34 Stirnplatte: Optimierte Variante 1 (oben) und 2 (unten).

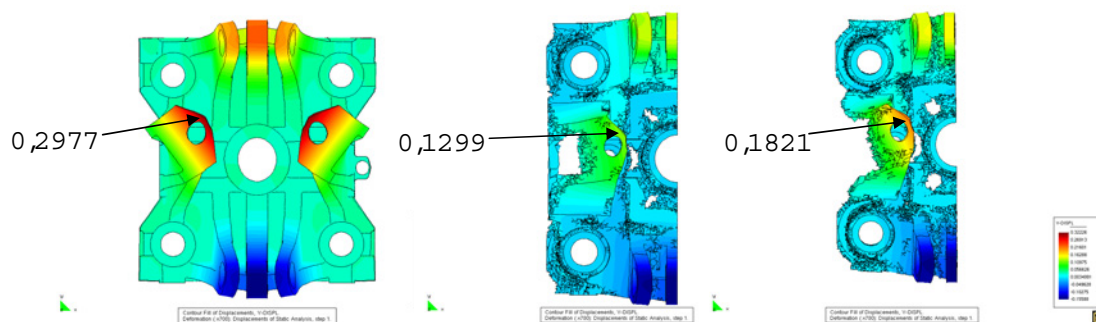


Abbildung 35 Stirnplatte: Vergleich der Verschiebung: Original und optimierte Varianten 1 und 2 (Lastfall 2). Die Verschiebungen sind 700-fach vergrößert dargestellt.

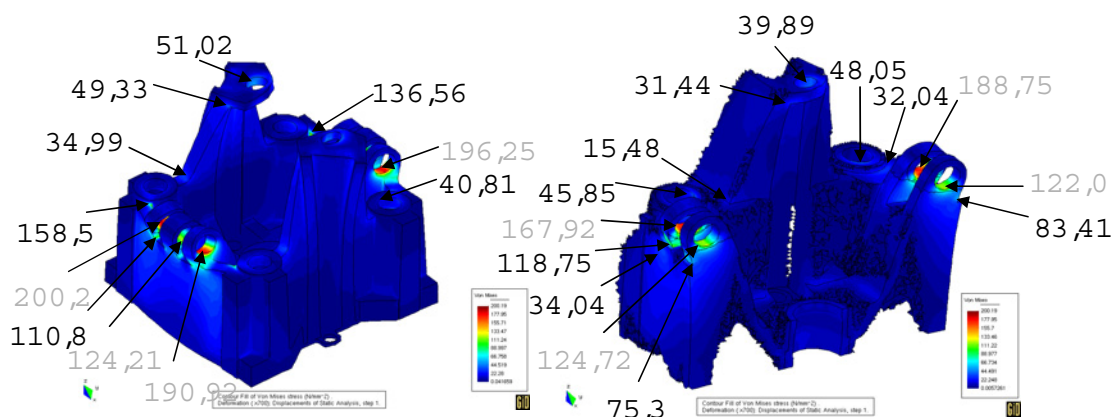


Abbildung 36

Stirnplatte: Spannungsverteilung: Original und optimierte Variante 1 (Lastfall 2). Graue Werte werden nicht berücksichtigt, da entsprechende Punkte im fixierten Volumen liegen. Die Verschiebungen sind 700-fach vergrößert dargestellt.

		Original	Bauraum	Variante1	Variante2
Volumen [dm ³]		837,4	1433,9	646,6*	584,7**
Abweichung [%]		x	71,2	-22,8	-30,2
Verschiebung [mm]	LF1	0,2835	0,2042	0,2107	0,2270
	LF2	0,3231	0,2041	0,2114	0,2414
	LF3	0,3209	0,2048	0,2113	0,2381
Abweichung [%]	LF1	x	-27,97	-25,69	-19,95
	LF2	x	-36,85	-34,58	-25,29
	LF3	x	-36,17	-34,14	-25,81
v. Mises [N/mm ²]	LF1	200,20	190,38	190,35	190,31
	LF2	200,19	190,35	190,31	190,25
	LF3	200,21	190,41	190,39	190,36
Abweichung [%]	LF1	x	-4,91	-4,92	-4,94
	LF2	x	-4,92	-4,94	-4,97
	LF3	x	-4,89	-4,90	-4,92

Abbildung 37

Stirnplatte: Zusammenfassung. Es besteht ein großes Optimierungspotenzial. Bei 30% Materialeinsparung können um ca. 20% geringere Verformungen (und niedrigere Spannungen) erzielt werden. *) Isofläche mit Dichte $\rho = 0,9$. **) Isofläche mit Dichte $\rho = 0,7$.

A.2 Pressenkopf von Römheld & Moelle

Ein weiteres Bauteil, das mit der Firma Römheld & Moelle als Benchmark bearbeitet wurde, ist der in Abbildung 38 gezeigte Pressenkopf. Da der Pressenkopf nicht wie die Schließ- und Stirnplatte der Spritzgießmaschine im Zusammenhang einer Maschine, sondern als isoliertes Bauteil bereitgestellt wurde, war es sehr schwierig, die auftretenden Lastfälle zu definieren. Abbildung 38 zeigt die Belastung und Lagerung. Fixierte Flächen sind durch Lagerungs-Symbole gekennzeichnet.

Zunächst wurden die Software-Pakete Pro/Mechanica und Pro/E benutzt. Bedingt durch die Verwendung hierarchischer Elemente war das FE-Netz hier noch relativ grob. Später wurde PERMAS als FE-Löser benutzt. Das Netz wurde verfeinert und bestand aus 449.652 Tetraeder-Elementen mit je 10 Knoten (Tet10) und 671.196 Knoten. Nach einem Vergleich der Genauigkeit wurde schließlich DDFEM aufgrund der höheren Geschwindigkeit als FE-Löser eingesetzt. Das neue FE-Netz bestand aus 1.294.956 Tetraeder-Elementen mit je 4 Knoten (Tet4) und 247.312 Knoten.

Der Pressenkopf wird aus GJS 400 gefertigt (vgl. Abschnitt A.1, Tabelle 1).

Eine Hälfte des Bauraums des Pressenkopfes ist in Abbildung 39 dargestellt. Der Lastfall ist mit dem des Originalteils identisch. Alle grün eingefärbten Flächen sind fixiert. Das FE-Netz bestand aus 790.502 Tet4-Elementen und 152.559 Knoten.

Bei der Topologieoptimierung wurde als Zielfunktion die Maximierung der Steifigkeit betrachtet. Zusätzlich waren folgende Nebenbedingungen zu berücksichtigen:

- Minimale Strebendicke/Wandstärke = 30.
- Maximale Strebendicke/Wandstärke = 100.
- Auszugsrichtung.
- Erhaltung der Symmetrie im Verlauf der Optimierung.
- Volumenreduktion um 35 %.

Fixierte Gebiete wurden anhand der CAD-Beschreibung des Bauteils bestimmt und als separate Volumen definiert, die nicht in der Optimierung berücksichtigt wurden.

Die erzielten Optimierungsergebnisse waren auf Grund einer sehr ungünstigen Verbindung des Druckzylinders mit den Führungszylindern nicht sinnvoll. Dies hat deutlich gemacht, dass der Lastfall und die Lagerung nicht realitätsnah definiert waren. Der Pressenkopf wird mit korrekter Lagerung und Randbedingungsbeschreibung im Rahmen des MIDPAG-Projekts weiter bearbeitet.

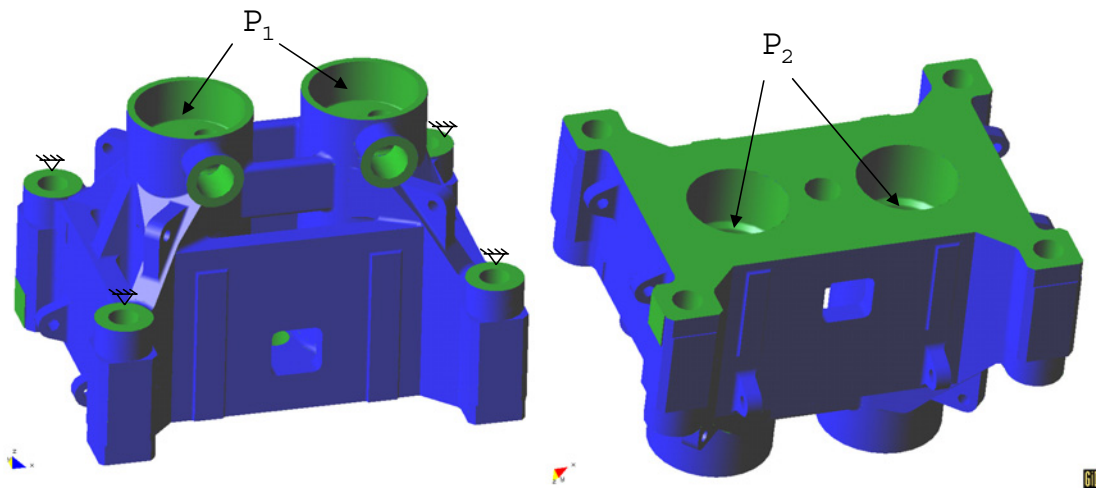


Abbildung 38

Originalbauteilgeometrie: Belastung und Lagerung; Druck $P_1 = 1$ MPa, Druck $P_2 = 27$ MPa.

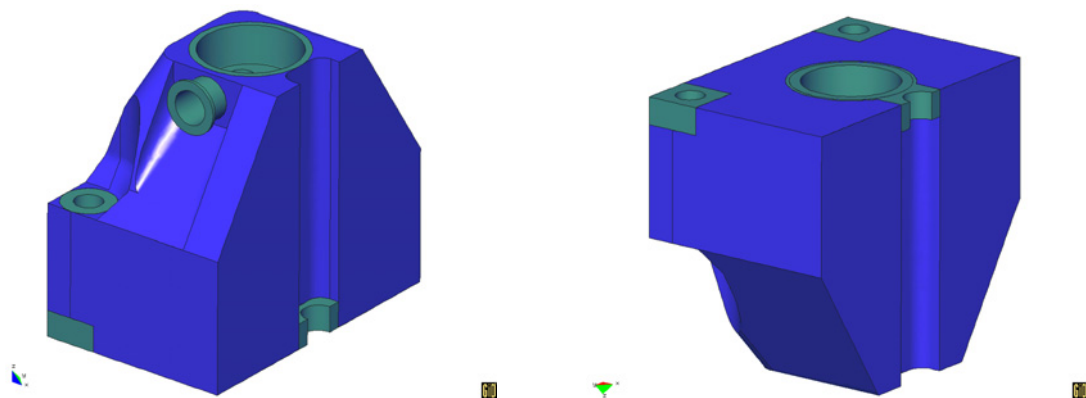


Abbildung 39

Bauraum (Ausnutzung der Symmetrie); Lastfall wie beim Original. Grün eingefärbte Flächen sind fixiert.

A.3 Rundschalttisch von hg2

Von der Firma hg2 wurde der Rundschalttisch aus Abbildung 40 als Benchmarkproblem freigegeben.

Für die Strukturanalyse wurden drei Lastfälle unterschieden und folgende Randbedingungen definiert: Es wird angenommen, dass auf den Rundtisch ein Planetenträger mit einer Gewichtskraft $G = 160.000 \text{ N}$ aufgebaut ist (vgl. Abbildung 41). Die Kraft G wird als Grundlast angenommen und geht in alle Berechnungen ein. Es wirken drei horizontale Kräfte $F_1 = 20.000 \text{ N}$ und zwei vertikale Kräfte $F_2 = 20.000 \text{ N}$, die aufgrund ihrer Lage (vgl. Abbildungen 41 und 42) folgende Momente ergeben:

- Moment $M1x = (1+\sqrt{2}) \cdot 1.500\text{mm} \cdot F_1 = 72.426 \text{ Nm}$.
- Moment $M2x = (1+0.5 \cdot \sqrt{2}) \cdot 2.000\text{mm} \cdot F_2 = 68.284 \text{ Nm}$.
- Moment $M2y = 0.5 \cdot \sqrt{2} \cdot 2.000\text{mm} \cdot F_2 = 28.284 \text{ Nm}$.

Bei allen Lastfällen entstehen aufgrund der Kräfte F_1 und F_2 Querkkräfte $Q = (1+\sqrt{2}) \cdot F_1 = 48.284 \text{ N}$ bzw. axiale Kräfte $2 F_2 = 40.000 \text{ N}$, die in den Berechnungen berücksichtigt werden.

Die genannten Kräfte und Momente werden zu drei Lastfällen zusammengefasst:

- Lastfall 1: $M1x$, Q und G .
- Lastfall 2: $M2x$, $M2y$, $2F_2$ und G .
- Lastfall 3: $M1x$, Q , $M2x$, $M2y$, $2F_2$ und G .

Außer den Lastfällen wurde auch das verwendete Material variiert. Zum Einsatz kamen:

- GJS 600 ($E = 174 \text{ GPa}$, $\nu = 0,275$) und
- GJL 350 ($E = 123 \text{ GPa}$, $\nu = 0,26$).

Die Strukturanalyse des Rundschalttischs wurde zunächst mit Pro/E bzw. PERMAS durchgeführt. Das PERMAS-Netz aus Tetraedern mit je 10 Knoten bestand aus 641.752 Elementen und 950.527 Knoten. Da die mit Pro/E erzielten Ergebnisse sich stark von den mit PERMAS errechneten Ergebnissen unterschieden, wurde DDFEM um Momentenrandbedingungen erweitert und als FE-Löser eingesetzt. Dadurch konnte der problematische Einsatz von RBE2- und RBE3-Elementen zur Krafteinleitung vermieden werden. DDFEM arbeitete auf zwei Netzen mit 641.752 Tet4-Elementen und 131.034 Knoten bzw. 3.614.504 Elemente und 673.438 Knoten.

Neben dem Originalbauteil wurde mit der Variante OPT1 (vgl. Abbildung 43) noch ein von hg2 gemachter Optimierungsvorschlag untersucht. Das PERMAS-Netz dieser Variante bestand aus 66.145 Tet10-Elementen und 110.798 Knoten, das DDFEM-Netz enthielt 66.145 Tet4-Elemente und 16.872

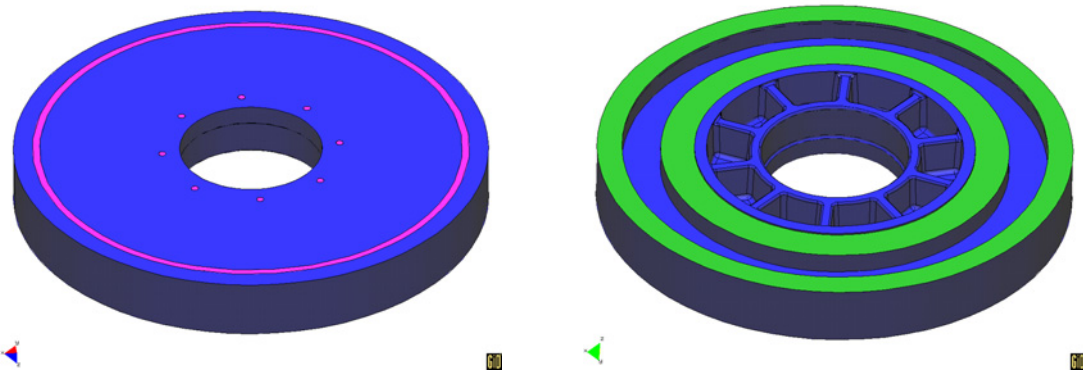


Abbildung 40

Originalbauteil mit Krafteinleitungsflächen an der Oberseite (rot) und Lagerungen (grün) an der Unterseite.

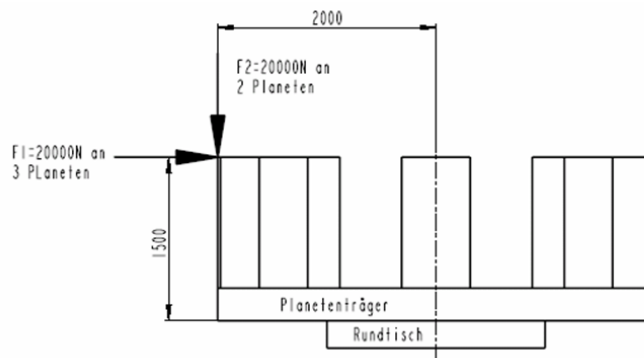


Abbildung 41

Rundscharltisch: Krafteinleitung, Seitenansicht.

Knoten.

Die Strukturanalyse hat ergeben, das Lastfall 3 der kritischste Lastfall ist (vgl. Abbildung 45).

Der Designrand der Shapeoptimierung bestand nur aus dem in Abbildung 40, rechts erkennbaren verrippten Teil. Alle anderen Bereiche waren aufgrund ihrer Funktion (Lagerung, Krafteinleitungsfläche) fixiert. Da der veränderbare Teil des Bauteils so eng begrenzt war, wurde auf eine Topologieoptimierung verzichtet, und eine Shapeoptimierung durchgeführt. Durch die Begrenzung des Designrands war das Optimierungspotenzial sehr gering. Die Optimierungsrechnungen wurden mit dem Material GJL 350 durchgeführt.

Die betrachtete Zielfunktion war die Minimierung der maximalen von-Mises-Spannung. Es wurden verschiedene Kombinationen der folgenden

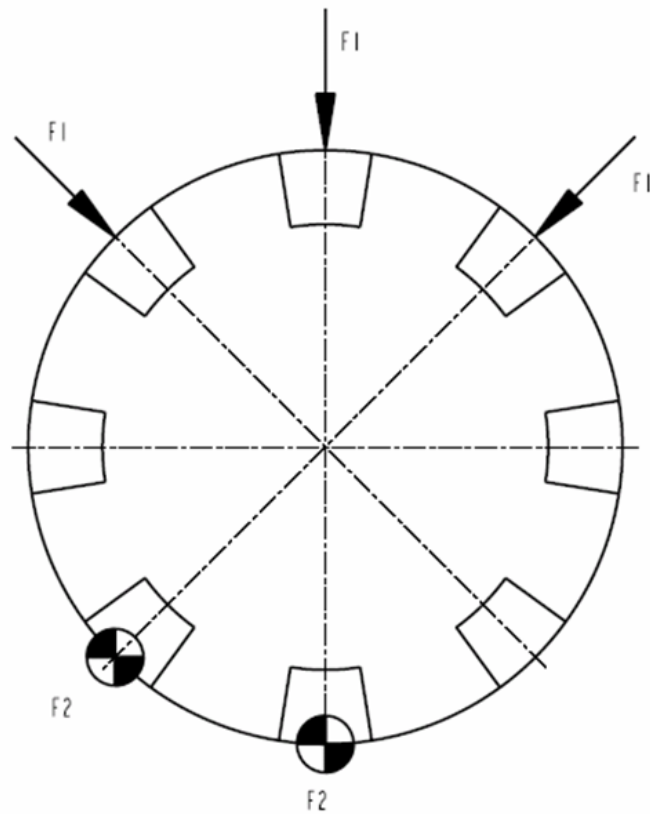


Abbildung 42

Rundschalttisch: Krafteinleitung, Draufsicht.

Nebenbedingungen ausprobiert, die jedoch alle das geringe Optimierungspotenzial bestätigten:

- Oberflächen-, Ebenen- und Punktsymmetrie.
- Konstante absolute Verschiebung.
- Variation der Tiefe (Anzahl an Elementschichten), bis zu der das Bauteil verändert werden durfte.
- Erweiterung des Designrandes um die Seitenflächen des Rundschalttisches.

Abbildung 44 zeigt die Ergebnisse der Shapeoptimierung des Originalteils (links) und der Variante OPT1 (rechts) nach 15 Iterationen. In beiden Fällen war die Minimierung der maximalen von-Mises-Spannung die Zielfunktion. Für OPT_15.1 wurden Ebenensymmetrie als Nebenbedingung verlangt, die obersten vier Element-Schichten der Struktur gehörten zum veränderbaren Gebiet. Für OPT1_15.10 wurde keine Symmetrie verlangt. Es waren nur die drei äußersten

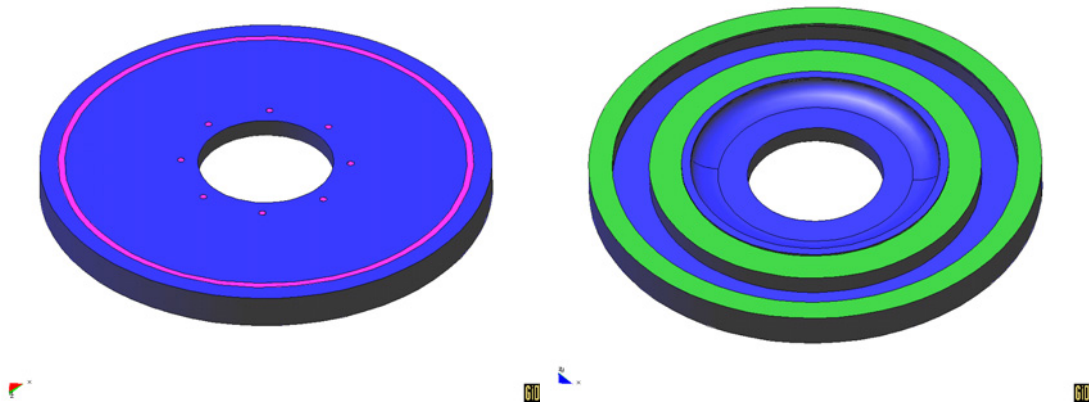


Abbildung 43

Variante OPT1; Lastfälle und Lagerung wie beim Originalbauteil.

Schichten Teil des veränderbaren Gebiets. Bei der Variante OPT1 lässt sich die beginnende Ausbildung von Rippen erkennen.

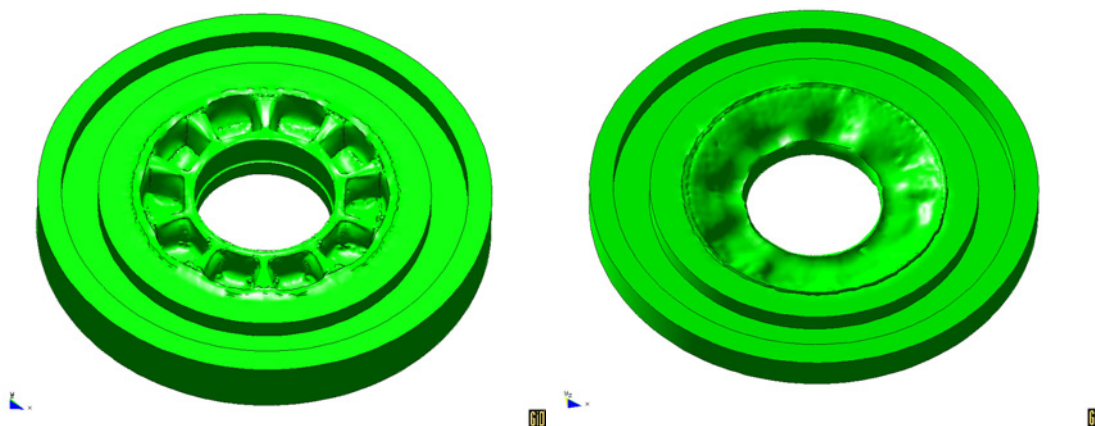


Abbildung 44

Links: Variante OPT_15.1 (Shapeoptimierung der Originalgeometrie, 15 Iterationen). Rechts: Variante OPT1_15.10 (Shapeoptimierung von OPT1, 15 Iterationen).

		orig_GJS600	orig_GJL350	opt15.1	opt1	opt1_15.10
Volumen [dm ³]		560,9	560,9	564,4	303,1	298,1
Abweichung [%]		x	x	0,6	-46,0	-46,9
Verschiebung [mm]	LF1	0,000696	0,000981	0,000989	0,001056	0,001327
	LF2	0,000804	0,001141	0,001147	0,001411	0,001183
	LF3	0,001097	0,001551	0,001560	0,002032	0,001846
Abweichung [%]	LF1	x	41,0	42,18	51,74	90,74
	LF2	x	41,8	42,60	75,37	47,03
	LF3	x	41,4	42,24	85,28	68,35
v. Mises [N/mm ²]	LF1	1,00	1,019	1,006	0,95	1,006
	LF2	1,23	1,242	1,180	1,16	1,180
	LF3	1,63	1,646	1,606	1,55	1,625
Abweichung [%]	LF1	x	1,4	0,09	-5,59	0,14
	LF2	x	1,1	-3,88	-5,55	-3,90
	LF3	x	1,2	-1,28	-4,55	-0,10

Abbildung 45

Zusammenfassung: Ergebnisse für Originalteil mit verschiedenen Materialien und für optimierte Varianten.

A.4 Kurbelwellenlagerdeckel

Die Firma Gienanth brachte einen Kurbelwellenlagerdeckel als Benchmark-Problem ein.

Lagerungen und Lastfälle sind in Abbildung 46 dargestellt: Der Lastfall, der wegen der Druckkraft, die von der Welle auf den Lagerdeckel ausgeübt wird, sehr kompliziert ist, wurde nur in Tabellenform spezifiziert. Die beiden Schrauben, die den Lagerdeckel fixieren, wurden durch Vorspannkkräfte ersetzt, die aus den Anziehmomenten der Schrauben errechnet wurden. Es wurden drei Lastfälle unterschieden:

- Lastfall 1: die Druckkraft LF wirkt senkrecht in einem Bereich von 30° .
- Lastfall 2: LF wirkt unter einem Winkel von 45° in einem Bereich von 30° .
- Lastfall 3: LF wirkt horizontal in einem Bereich von 15° .

Die Strukturanalyse wurde zunächst unter Ausnutzung der Symmetrie des Bauteils auf einer Hälfte des Lagerdeckels durchgeführt. Später wurde wegen der komplizierten Lastfälle der gesamte Lagerdeckel berechnet.

Anfangs wurde die Strukturanalyse mit PERMAS durchgeführt. Es wurden Tet4- und Tet10-Elemente verwendet, das Tet10-Netz bestand aus 117.446 Elementen und 184.817 Knoten (ganzes Bauteil). Später wurde DDFEM eingesetzt. DDFEM rechnete auf einem Netz aus 620.954 Tet4-Elementen und 119.658 Knoten (ganzes Bauteil).

Das verwendete Material war GJS 600 ($E = 174 \text{ GPa}$, $\nu = 0,275$).

Bei der Topologieoptimierung wurde die Maximierung der Steifigkeit als Zielfunktion verwendet. Die Nebenbedingungen waren:

- Volumenreduktion um 10 % bis 30 %.
- Minimale Strebendicke = 6.
- Auszugsrichtung in z-Richtung.
- Berücksichtigung einer Mittelebene im Verlauf der Optimierung.

Es wurden verschiedene Varianten der genannten Nebenbedingungen ausprobiert. Teilweise wurde auch ganz ohne fixierte Elemente und nur mit einer Volumenrestriktion gerechnet, um zu sehen, wie sich das Bauteil entwickelt.

Eine mit PERMAS und TOSCA durchgeführte Topologieoptimierung des Bauteils ergab die in Abbildung 47 gezeigten Ergebnisse (Variante OPT13). Fixierte Elemente (Knoten, Flächen) sind grau eingefärbt. Manuelle Nachkonstruktionen der Struktur in Abbildung 47 ergaben die Varianten OPT1 und OPT2 (vgl. Abbildung 48 bzw. 49).

Nach einer Strukturanalyse der Nachkonstruktionen OPT1 und OPT2 mit DDFEM wurden die Varianten OPT4 und OPT5 vorgeschlagen (vgl. Abbildungen 51 und

52), die sich in der Dicke der Mittelwand und der Rippe auf der Mittelwand unterscheiden. Die Shapeoptimierung einer weiteren Variante OPT3 lieferte so schlechte Ergebnisse, dass diese Variante im folgenden nicht weiter berücksichtigt wurde.

Die verschiedenen Varianten wurden wie folgt vernetzt:

- OPT1: 178.978 Elemente, 274.551 bzw. 39150 Knoten (Tet10- bzw. Tet4-Netz).
- OPT2: 248.904 Elemente, 370.708 bzw. 51578 Knoten (Tet10- bzw. Tet4-Netz).
- OPT4: 793.820 Elemente, 151.407 Knoten (Tet4-Netz).
- OPT5: 796.480 Elemente, 151.991 Knoten (Tet4-Netz).

In den Tabellen 50, 53 und 54 sind die Ergebnisse der Strukturanalysen für das Originalteil und optimierte Varianten zusammengefasst.

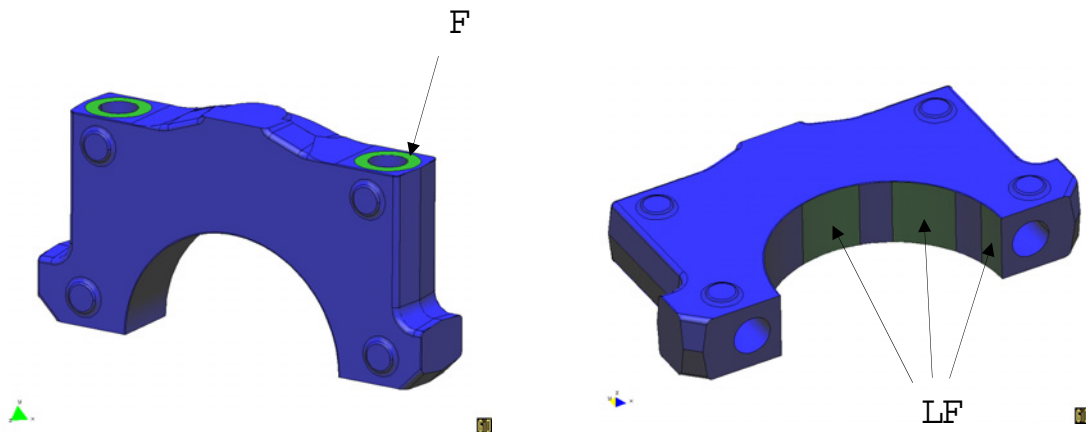


Abbildung 46

Originalbauteil: Lastfälle und Lagerung; Vorspannkraft $F = 42.904 \text{ N}$; Druckkraft $LF = 68.954 \text{ N}$; Lastfall LF1: senkrecht, Lastfall LF2: schräg, Lastfall LF3: horizontal.

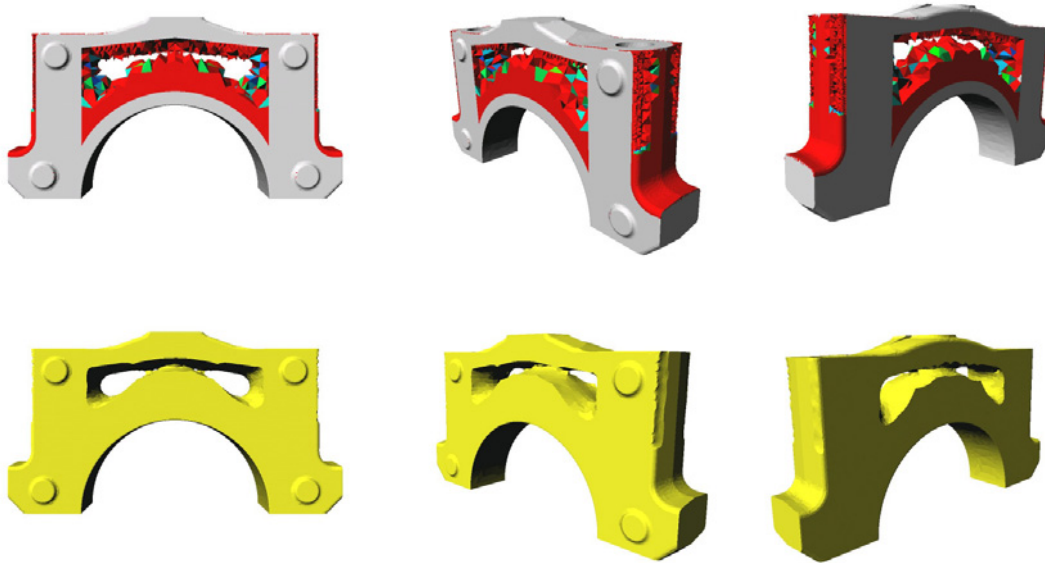


Abbildung 47

Topologieoptimierung: Variante OPT13; Zielfunktion: Maximierung der Steifigkeit mit Volumenreduzierung um 15%. Erste Zeile: 13. Iteration; zweite Zeile: Isofläche mit Dichte $\rho = 0,7$.

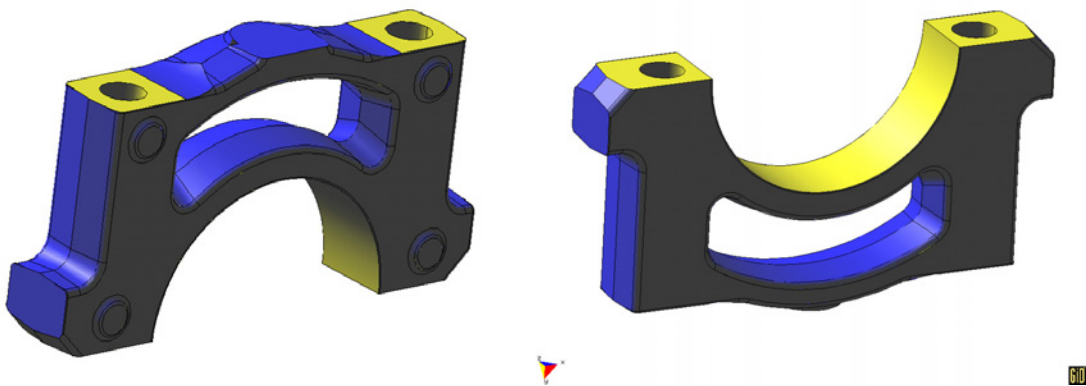


Abbildung 48

Variante OPT1: Vorschlag für Rekonstruktion nach Topologieoptimierung.

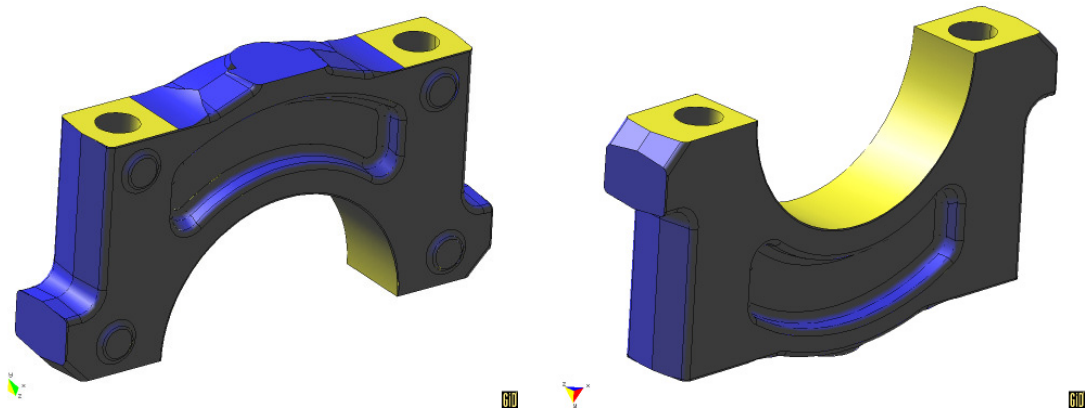


Abbildung 49

Variante OPT2: Vorschlag für Rekonstruktion nach Topologieoptimierung.

		Original	opt1	opt2	opt13
Volumen [cm ³]		197,4	164,6	184,7	193,3
Abweichung [%]		x	-16,6	-6,4	-2,1
Verschiebung [mm]	LF1	0,051288	0,209	0,1	0,083
	LF2	0,054368	0,135	0,1	0,097
	LF3	0,076306	0,108	0,1	0,039
Abweichung [%]	LF1	x	309,80	33,4	62,14
	LF2	x	150,00	4,4	79,96
	LF3	x	42,11	12,9	-48,18
v. Mises [N/mm ²]	LF1	142,85	634,90	318,8	411,00
	LF2	242,67	499,00	283,0	364,00
	LF3	253,32	307,00	388,0	585,40
Abweichung [%]	LF1	x	344,45	123,2	187,71
	LF2	x	105,63	16,6	50,00
	LF3	x	21,19	53,2	131,09

Abbildung 50

Zusammenfassung: Ergebnisse. Variante OPT1 liefert zu große Verschiebungen und Spannungen. Variante OPT2 liefert bessere Ergebnisse.

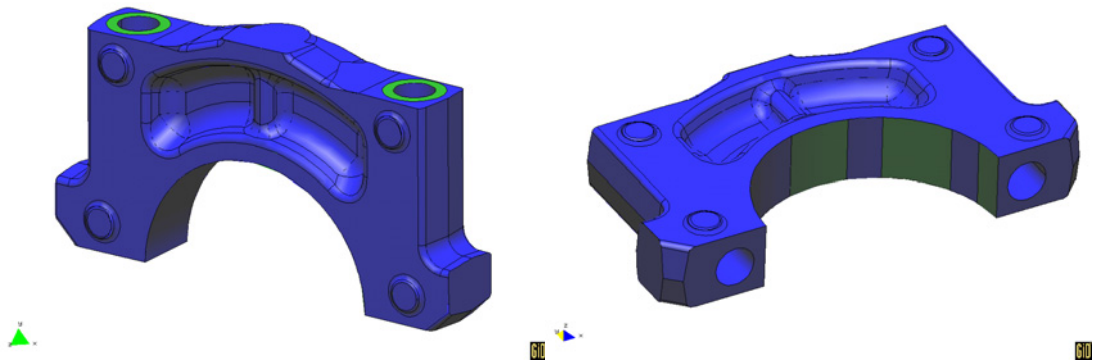


Abbildung 51 Variante OPT4: weiterer Vorschlag.

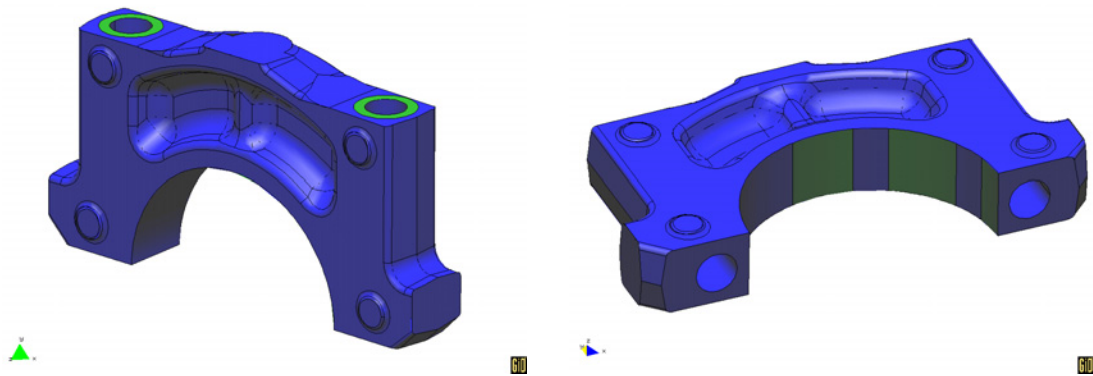


Abbildung 52 Variante OPT5: weiterer Vorschlag.

Die Variante OPT5 wurde im Rahmen einer Shapeoptimierung mit TOSCA und DDFEM weiter bearbeitet. Dabei wurden folgende Restriktionen berücksichtigt:

- Symmetrie in x- und z-Richtung.
- Designrand: Vertiefungen in der Front- und Rückseite, Seitenflächen.
- Designraum reicht von der Oberfläche 6 "Elementschichten" tief.

Zielfunktion war die Minimierung der maximalen von-Mises-Spannung. Es wurden 10 Iterationen durchgeführt.

		Original	opt4	opt5
Volumen [cm ³]		197,4	163,7	164,0
Abweichung [%]		x	-17,1	-16,9
Verschiebung [mm]	LF1	0,051288	0,086709	0,085385
	LF2	0,054368	0,069506	0,069274
	LF3	0,076306	0,078814	0,078683
Abweichung [%]	LF1	x	69,1	66,5
	LF2	x	27,8	27,4
	LF3	x	3,3	3,1
v. Mises [N/mm ²]	LF1	142,85	290,57	246,13
	LF2	242,67	268,42	267,64
	LF3	253,32	248,63	249,26
Abweichung [%]	LF1	x	103,4	72,3
	LF2	x	10,6	10,3
	LF3	x	-1,9	-1,6

Abbildung 53

Zusammenfassung: Ergebnisse für Originalbauteil und optimierte Varianten OPT4 und OPT5.

		Original	opt5	opt5_10
Volumen [cm ³]		197,4	164,0	168,8
Abweichung [%]		x	-16,9	-14,5
Verschiebung [mm]	LF1	0,051288	0,085385	0,07112
	LF2	0,054368	0,069274	0,06055
	LF3	0,076306	0,078683	0,07336
Abweichung [%]	LF1	x	66,5	38,67
	LF2	x	27,4	11,37
	LF3	x	3,1	-3,86
v. Mises [N/mm ²]	LF1	142,85	246,13	177,71
	LF2	242,67	267,64	212,80
	LF3	253,32	249,26	173,28
Abweichung [%]	LF1	x	72,3	24,40
	LF2	x	10,3	-12,31
	LF3	x	-1,6	-31,60

Abbildung 54

Zusammenfassung: Ergebnisse für Original und optimierte Varianten OPT5 und OPT5_10.

Published reports of the Fraunhofer ITWM

The PDF-files of the following reports are available under:

www.itwm.fraunhofer.de/de/zentral__berichte/berichte

1. D. Hietel, K. Steiner, J. Struckmeier

A Finite - Volume Particle Method for Compressible Flows

We derive a new class of particle methods for conservation laws, which are based on numerical flux functions to model the interactions between moving particles. The derivation is similar to that of classical Finite-Volume methods; except that the fixed grid structure in the Finite-Volume method is substituted by so-called mass packets of particles. We give some numerical results on a shock wave solution for Burgers equation as well as the well-known one-dimensional shock tube problem.

(19 pages, 1998)

2. M. Feldmann, S. Seibold

Damage Diagnosis of Rotors: Application of Hilbert Transform and Multi-Hypothesis Testing

In this paper, a combined approach to damage diagnosis of rotors is proposed. The intention is to employ signal-based as well as model-based procedures for an improved detection of size and location of the damage. In a first step, Hilbert transform signal processing techniques allow for a computation of the signal envelope and the instantaneous frequency, so that various types of non-linearities due to a damage may be identified and classified based on measured response data. In a second step, a multi-hypothesis bank of Kalman Filters is employed for the detection of the size and location of the damage based on the information of the type of damage provided by the results of the Hilbert transform.

Keywords: Hilbert transform, damage diagnosis, Kalman filtering, non-linear dynamics

(23 pages, 1998)

3. Y. Ben-Haim, S. Seibold

Robust Reliability of Diagnostic Multi-Hypothesis Algorithms: Application to Rotating Machinery

Damage diagnosis based on a bank of Kalman filters, each one conditioned on a specific hypothesized system condition, is a well recognized and powerful diagnostic tool. This multi-hypothesis approach can be applied to a wide range of damage conditions. In this paper, we will focus on the diagnosis of cracks in rotating machinery. The question we address is: how to optimize the multi-hypothesis algorithm with respect to the uncertainty of the spatial form and location of cracks and their resulting dynamic effects. First, we formulate a measure of the reliability of the diagnostic algorithm, and then we discuss modifications of the diagnostic algorithm for the maximization of the reliability. The reliability of a diagnostic algorithm is measured by the amount of uncertainty consistent with no-failure of the diagnosis. Uncertainty is quantitatively represented with convex models.

Keywords: Robust reliability, convex models, Kalman filtering, multi-hypothesis diagnosis, rotating machinery, crack diagnosis

(24 pages, 1998)

4. F.-Th. Lentjes, N. Siedow

Three-dimensional Radiative Heat Transfer in Glass Cooling Processes

For the numerical simulation of 3D radiative heat transfer in glasses and glass melts, practically applicable mathematical methods are needed to handle such problems optimal using workstation class computers.

Since the exact solution would require super-computer capabilities we concentrate on approximate solutions with a high degree of accuracy. The following approaches are studied: 3D diffusion approximations and 3D ray-tracing methods.

(23 pages, 1998)

5. A. Klar, R. Wegener

A hierarchy of models for multilane vehicular traffic Part I: Modeling

In the present paper multilane models for vehicular traffic are considered. A microscopic multilane model based on reaction thresholds is developed. Based on this model an Enskog like kinetic model is developed. In particular, care is taken to incorporate the correlations between the vehicles. From the kinetic model a fluid dynamic model is derived. The macroscopic coefficients are deduced from the underlying kinetic model. Numerical simulations are presented for all three levels of description in [10]. Moreover, a comparison of the results is given there.

(23 pages, 1998)

Part II: Numerical and stochastic investigations

In this paper the work presented in [6] is continued. The present paper contains detailed numerical investigations of the models developed there. A numerical method to treat the kinetic equations obtained in [6] are presented and results of the simulations are shown. Moreover, the stochastic correlation model used in [6] is described and investigated in more detail.

(17 pages, 1998)

6. A. Klar, N. Siedow

Boundary Layers and Domain Decomposition for Radiative Heat Transfer and Diffusion Equations: Applications to Glass Manufacturing Processes

In this paper domain decomposition methods for radiative transfer problems including conductive heat transfer are treated. The paper focuses on semi-transparent materials, like glass, and the associated conditions at the interface between the materials. Using asymptotic analysis we derive conditions for the coupling of the radiative transfer equations and a diffusion approximation. Several test cases are treated and a problem appearing in glass manufacturing processes is computed. The results clearly show the advantages of a domain decomposition approach. Accuracy equivalent to the solution of the global radiative transfer solution is achieved, whereas computation time is strongly reduced.

(24 pages, 1998)

7. I. Choquet

Heterogeneous catalysis modelling and numerical simulation in rarified gas flows Part I: Coverage locally at equilibrium

A new approach is proposed to model and simulate numerically heterogeneous catalysis in rarefied gas flows. It is developed to satisfy all together the following points:

- 1) describe the gas phase at the microscopic scale, as required in rarefied flows,
- 2) describe the wall at the macroscopic scale, to avoid prohibitive computational costs and consider not only crystalline but also amorphous surfaces,
- 3) reproduce on average macroscopic laws correlated with experimental results and
- 4) derive analytic models in a systematic and exact way. The problem is stated in the general framework of a non static flow in the vicinity of a catalytic and non porous surface (without aging). It is shown that the exact and systematic resolution method based on the Laplace transform, introduced previously by the author to model collisions in the gas phase, can be extended to the present problem. The proposed approach is applied to the modelling of the EleyRideal and LangmuirHinshelwood recombinations, assuming that the coverage is locally at equilibrium. The models are developed considering one atomic species and

extended to the general case of several atomic species. Numerical calculations show that the models derived in this way reproduce with accuracy behaviors observed experimentally.

(24 pages, 1998)

8. J. Ohser, B. Steinbach, C. Lang

Efficient Texture Analysis of Binary Images

A new method of determining some characteristics of binary images is proposed based on a special linear filtering. This technique enables the estimation of the area fraction, the specific line length, and the specific integral of curvature. Furthermore, the specific length of the total projection is obtained, which gives detailed information about the texture of the image. The influence of lateral and directional resolution depending on the size of the applied filter mask is discussed in detail. The technique includes a method of increasing directional resolution for texture analysis while keeping lateral resolution as high as possible.

(17 pages, 1998)

9. J. Orlik

Homogenization for viscoelasticity of the integral type with aging and shrinkage

A multiphase composite with periodic distributed inclusions with a smooth boundary is considered in this contribution. The composite component materials are supposed to be linear viscoelastic and aging (of the non-convolution integral type, for which the Laplace transform with respect to time is not effectively applicable) and are subjected to isotropic shrinkage. The free shrinkage deformation can be considered as a fictitious temperature deformation in the behavior law. The procedure presented in this paper proposes a way to determine average (effective homogenized) viscoelastic and shrinkage (temperature) composite properties and the homogenized stressfield from known properties of the components. This is done by the extension of the asymptotic homogenization technique known for pure elastic nonhomogeneous bodies to the nonhomogeneous thermoviscoelasticity of the integral nonconvolution type. Up to now, the homogenization theory has not covered viscoelasticity of the integral type. SanchezPalencia (1980), Francfort & Suquet (1987) (see [2], [9]) have considered homogenization for viscoelasticity of the differential form and only up to the first derivative order. The integralmodeled viscoelasticity is more general than the differential one and includes almost all known differential models. The homogenization procedure is based on the construction of an asymptotic solution with respect to a period of the composite structure. This reduces the original problem to some auxiliary boundary value problems of elasticity and viscoelasticity on the unit periodic cell, of the same type as the original non-homogeneous problem. The existence and uniqueness results for such problems were obtained for kernels satisfying some constrain conditions. This is done by the extension of the Volterra integral operator theory to the Volterra operators with respect to the time, whose 1 kernels are space linear operators for any fixed time variables. Some ideas of such approach were proposed in [11] and [12], where the Volterra operators with kernels depending additionally on parameter were considered. This manuscript delivers results of the same nature for the case of the spaceoperator kernels.

(20 pages, 1998)

10. J. Mohring

Helmholtz Resonators with Large Aperture

The lowest resonant frequency of a cavity resonator is usually approximated by the classical Helmholtz formula. However, if the opening is rather large and the front wall is narrow this formula is no longer valid. Here we present a correction which is of third order in the ratio of the diameters of aperture and cavity. In addition to the high accuracy it allows to estimate the damping due to radiation. The result is found by applying the method of matched asymptotic expansions. The correction contains form factors describing the shapes of opening and cavity. They are computed for a number of standard geometries. Results are compared with numerical computations.

(21 pages, 1998)

11. H. W. Hamacher, A. Schöbel

On Center Cycles in Grid Graphs

Finding “good” cycles in graphs is a problem of great interest in graph theory as well as in locational analysis. We show that the center and median problems are NP hard in general graphs. This result holds both for the variable cardinality case (i.e. all cycles of the graph are considered) and the fixed cardinality case (i.e. only cycles with a given cardinality p are feasible). Hence it is of interest to investigate special cases where the problem is solvable in polynomial time. In grid graphs, the variable cardinality case is, for instance, trivially solvable if the shape of the cycle can be chosen freely. If the shape is fixed to be a rectangle one can analyze rectangles in grid graphs with, in sequence, fixed dimension, fixed cardinality, and variable cardinality. In all cases a complete characterization of the optimal cycles and closed form expressions of the optimal objective values are given, yielding polynomial time algorithms for all cases of center rectangle problems. Finally, it is shown that center cycles can be chosen as rectangles for small cardinalities such that the center cycle problem in grid graphs is in these cases completely solved. (15 pages, 1998)

12. H. W. Hamacher, K.-H. Küfer

Inverse radiation therapy planning - a multiple objective optimisation approach

For some decades radiation therapy has been proved successful in cancer treatment. It is the major task of clinical radiation treatment planning to realize on the one hand a high level dose of radiation in the cancer tissue in order to obtain maximum tumor control. On the other hand it is obvious that it is absolutely necessary to keep in the tissue outside the tumor, particularly in organs at risk, the unavoidable radiation as low as possible.

No doubt, these two objectives of treatment planning - high level dose in the tumor, low radiation outside the tumor - have a basically contradictory nature. Therefore, it is no surprise that inverse mathematical models with dose distribution bounds tend to be infeasible in most cases. Thus, there is need for approximations compromising between overdosing the organs at risk and underdosing the target volume.

Differing from the currently used time consuming iterative approach, which measures deviation from an ideal (non-achievable) treatment plan using recursively trial-and-error weights for the organs of interest, we go a new way trying to avoid a priori weight choices and consider the treatment planning problem as a multiple objective linear programming problem: with each organ of interest, target tissue as well as organs at risk, we associate an objective function measuring the maximal deviation from the prescribed doses.

We build up a data base of relatively few efficient solutions representing and approximating the variety of Pareto solutions of the multiple objective linear programming problem. This data base can be easily scanned by physicians looking for an adequate treatment plan with the aid of an appropriate online tool. (14 pages, 1999)

13. C. Lang, J. Ohser, R. Hilfer

On the Analysis of Spatial Binary Images

This paper deals with the characterization of microscopically heterogeneous, but macroscopically homogeneous spatial structures. A new method is presented which is strictly based on integral-geometric formulae such as Crofton’s intersection formulae and Hadwiger’s recursive definition of the Euler number. The corresponding algorithms have clear advantages over other techniques. As an example of application we consider the analysis of spatial digital images produced by means of Computer Assisted Tomography. (20 pages, 1999)

14. M. Junk

On the Construction of Discrete Equilibrium Distributions for Kinetic Schemes

A general approach to the construction of discrete equilibrium distributions is presented. Such distribution functions can be used to set up Kinetic Schemes as well as Lattice Boltzmann methods. The general prin-

ciples are also applied to the construction of Chapman Enskog distributions which are used in Kinetic Schemes for compressible Navier-Stokes equations. (24 pages, 1999)

15. M. Junk, S. V. Raghurame Rao

A new discrete velocity method for Navier-Stokes equations

The relation between the Lattice Boltzmann Method, which has recently become popular, and the Kinetic Schemes, which are routinely used in Computational Fluid Dynamics, is explored. A new discrete velocity model for the numerical solution of Navier-Stokes equations for incompressible fluid flow is presented by combining both the approaches. The new scheme can be interpreted as a pseudo-compressibility method and, for a particular choice of parameters, this interpretation carries over to the Lattice Boltzmann Method. (20 pages, 1999)

16. H. Neunzert

Mathematics as a Key to Key Technologies

The main part of this paper will consist of examples, how mathematics really helps to solve industrial problems; these examples are taken from our Institute for Industrial Mathematics, from research in the Technomathematics group at my university, but also from ECMI groups and a company called TecMath, which originated 10 years ago from my university group and has already a very successful history. (39 pages (4 PDF-Files), 1999)

17. J. Ohser, K. Sandau

Considerations about the Estimation of the Size Distribution in Wickse’s Corpuscle Problem

Wickse’s corpuscle problem deals with the estimation of the size distribution of a population of particles, all having the same shape, using a lower dimensional sampling probe. This problem was originally formulated for particle systems occurring in life sciences but its solution is of actual and increasing interest in materials science. From a mathematical point of view, Wickse’s problem is an inverse problem where the interesting size distribution is the unknown part of a Volterra equation. The problem is often regarded ill-posed, because the structure of the integrand implies unstable numerical solutions. The accuracy of the numerical solutions is considered here using the condition number, which allows to compare different numerical methods with different (equidistant) class sizes and which indicates, as one result, that a finite section thickness of the probe reduces the numerical problems. Furthermore, the relative error of estimation is computed which can be split into two parts. One part consists of the relative discretization error that increases for increasing class size, and the second part is related to the relative statistical error which increases with decreasing class size. For both parts, upper bounds can be given and the sum of them indicates an optimal class width depending on some specific constants. (18 pages, 1999)

18. E. Carrizosa, H. W. Hamacher, R. Klein, S. Nickel

Solving nonconvex planar location problems by finite dominating sets

It is well-known that some of the classical location problems with polyhedral gauges can be solved in polynomial time by finding a finite dominating set, i.e. a finite set of candidates guaranteed to contain at least one optimal location.

In this paper it is first established that this result holds for a much larger class of problems than currently considered in the literature. The model for which this result can be proven includes, for instance, location problems with attraction and repulsion, and location-allocation problems.

Next, it is shown that the approximation of general gauges by polyhedral ones in the objective function of our general model can be analyzed with regard to the subsequent error in the optimal objective value. For the approximation problem two different approaches are described, the sandwich procedure and the greedy

algorithm. Both of these approaches lead - for fixed epsilon - to polynomial approximation algorithms with accuracy epsilon for solving the general model considered in this paper.

Keywords: Continuous Location, Polyhedral Gauges, Finite Dominating Sets, Approximation, Sandwich Algorithm, Greedy Algorithm (19 pages, 2000)

19. A. Becker

A Review on Image Distortion Measures

Within this paper we review image distortion measures. A distortion measure is a criterion that assigns a “quality number” to an image. We distinguish between mathematical distortion measures and those distortion measures in-cooperating a priori knowledge about the imaging devices (e.g. satellite images), image processing algorithms or the human physiology. We will consider representative examples of different kinds of distortion measures and are going to discuss them.

Keywords: Distortion measure, human visual system (26 pages, 2000)

20. H. W. Hamacher, M. Labbé, S. Nickel, T. Sonneborn

Polyhedral Properties of the Uncapacitated Multiple Allocation Hub Location Problem

We examine the feasibility polyhedron of the uncapacitated hub location problem (UHL) with multiple allocation, which has applications in the fields of air passenger and cargo transportation, telecommunication and postal delivery services. In particular we determine the dimension and derive some classes of facets of this polyhedron. We develop some general rules about lifting facets from the uncapacitated facility location (UFL) for UHL and projecting facets from UHL to UFL. By applying these rules we get a new class of facets for UHL which dominates the inequalities in the original formulation. Thus we get a new formulation of UHL whose constraints are all facet-defining. We show its superior computational performance by benchmarking it on a well known data set.

Keywords: integer programming, hub location, facility location, valid inequalities, facets, branch and cut (21 pages, 2000)

21. H. W. Hamacher, A. Schöbel

Design of Zone Tariff Systems in Public Transportation

Given a public transportation system represented by its stops and direct connections between stops, we consider two problems dealing with the prices for the customers: The fare problem in which subsets of stops are already aggregated to zones and “good” tariffs have to be found in the existing zone system. Closed form solutions for the fare problem are presented for three objective functions. In the zone problem the design of the zones is part of the problem. This problem is NP hard and we therefore propose three heuristics which prove to be very successful in the redesign of one of Germany’s transportation systems. (30 pages, 2001)

22. D. Hietel, M. Junk, R. Keck, D. Teleaga

The Finite-Volume-Particle Method for Conservation Laws

In the Finite-Volume-Particle Method (FVPM), the weak formulation of a hyperbolic conservation law is discretized by restricting it to a discrete set of test functions. In contrast to the usual Finite-Volume approach, the test functions are not taken as characteristic functions of the control volumes in a spatial grid, but are chosen from a partition of unity with smooth and overlapping partition functions (the particles), which can even move along pre-scribed velocity fields. The information exchange between particles is based on standard numerical flux functions. Geometrical information, similar to the surface area of the cell faces in the Finite-Volume Method and the corresponding normal directions are given as integral quantities of the partition functions. After a brief derivation of the Finite-Volume-Particle Method, this work focuses on the role of the geometric coefficients in the scheme. (16 pages, 2001)

23. T. Bender, H. Hennes, J. Kalcsics,
M. T. Melo, S. Nickel

Location Software and Interface with GIS and Supply Chain Management

The objective of this paper is to bridge the gap between location theory and practice. To meet this objective focus is given to the development of software capable of addressing the different needs of a wide group of users. There is a very active community on location theory encompassing many research fields such as operations research, computer science, mathematics, engineering, geography, economics and marketing. As a result, people working on facility location problems have a very diverse background and also different needs regarding the software to solve these problems. For those interested in non-commercial applications (e. g. students and researchers), the library of location algorithms (LoLA can be of considerable assistance. LoLA contains a collection of efficient algorithms for solving planar, network and discrete facility location problems. In this paper, a detailed description of the functionality of LoLA is presented. In the fields of geography and marketing, for instance, solving facility location problems requires using large amounts of demographic data. Hence, members of these groups (e. g. urban planners and sales managers) often work with geographical information too. To address the specific needs of these users, LoLA was linked to a geographical information system (GIS) and the details of the combined functionality are described in the paper. Finally, there is a wide group of practitioners who need to solve large problems and require special purpose software with a good data interface. Many of such users can be found, for example, in the area of supply chain management (SCM). Logistics activities involved in strategic SCM include, among others, facility location planning. In this paper, the development of a commercial location software tool is also described. The tool is embedded in the Advanced Planner and Optimizer SCM software developed by SAP AG, Walldorf, Germany. The paper ends with some conclusions and an outlook to future activities.

Keywords: facility location, software development, geographical information systems, supply chain management (48 pages, 2001)

24. H. W. Hamacher, S. A. Tjandra

Mathematical Modelling of Evacuation Problems: A State of Art

This paper details models and algorithms which can be applied to evacuation problems. While it concentrates on building evacuation many of the results are applicable also to regional evacuation. All models consider the time as main parameter, where the travel time between components of the building is part of the input and the overall evacuation time is the output. The paper distinguishes between macroscopic and microscopic evacuation models both of which are able to capture the evacuees' movement over time.

Macroscopic models are mainly used to produce good lower bounds for the evacuation time and do not consider any individual behavior during the emergency situation. These bounds can be used to analyze existing buildings or help in the design phase of planning a building. Macroscopic approaches which are based on dynamic network flow models (minimum cost dynamic flow, maximum dynamic flow, universal maximum flow, quickest path and quickest flow) are described. A special feature of the presented approach is the fact, that travel times of evacuees are not restricted to be constant, but may be density dependent. Using multi-criteria optimization priority regions and blockage due to fire or smoke may be considered. It is shown how the modelling can be done using time parameter either as discrete or continuous parameter.

Microscopic models are able to model the individual evacuee's characteristics and the interaction among evacuees which influence their movement. Due to the corresponding huge amount of data one uses simulation approaches. Some probabilistic laws for individual evacuee's movement are presented. Moreover ideas to model the evacuee's movement using cellular automata (CA) and resulting software are presented. In this paper we will focus on macroscopic models and only summarize some of the results of the microscopic

approach. While most of the results are applicable to general evacuation situations, we concentrate on building evacuation. (44 pages, 2001)

25. J. Kuhnert, S. Tiwari

Grid free method for solving the Poisson equation

A Grid free method for solving the Poisson equation is presented. This is an iterative method. The method is based on the weighted least squares approximation in which the Poisson equation is enforced to be satisfied in every iterations. The boundary conditions can also be enforced in the iteration process. This is a local approximation procedure. The Dirichlet, Neumann and mixed boundary value problems on a unit square are presented and the analytical solutions are compared with the exact solutions. Both solutions matched perfectly.

Keywords: Poisson equation, Least squares method, Grid free method (19 pages, 2001)

26. T. Götz, H. Rave, D. Reinelt-Bitzer,
K. Steiner, H. Tiemeier

Simulation of the fiber spinning process

To simulate the influence of process parameters to the melt spinning process a fiber model is used and coupled with CFD calculations of the quench air flow. In the fiber model energy, momentum and mass balance are solved for the polymer mass flow. To calculate the quench air the Lattice Boltzmann method is used. Simulations and experiments for different process parameters and hole configurations are compared and show a good agreement.

Keywords: Melt spinning, fiber model, Lattice Boltzmann, CFD (19 pages, 2001)

27. A. Zemitis

On interaction of a liquid film with an obstacle

In this paper mathematical models for liquid films generated by impinging jets are discussed. Attention is stressed to the interaction of the liquid film with some obstacle. S. G. Taylor [Proc. R. Soc. London Ser. A 253, 313 (1959)] found that the liquid film generated by impinging jets is very sensitive to properties of the wire which was used as an obstacle. The aim of this presentation is to propose a modification of the Taylor's model, which allows to simulate the film shape in cases, when the angle between jets is different from 180°. Numerical results obtained by discussed models give two different shapes of the liquid film similar as in Taylor's experiments. These two shapes depend on the regime: either droplets are produced close to the obstacle or not. The difference between two regimes becomes larger if the angle between jets decreases. Existence of such two regimes can be very essential for some applications of impinging jets, if the generated liquid film can have a contact with obstacles.

Keywords: impinging jets, liquid film, models, numerical solution, shape (22 pages, 2001)

28. I. Ginzburg, K. Steiner

Free surface lattice-Boltzmann method to model the filling of expanding cavities by Bingham Fluids

The filling process of viscoplastic metal alloys and plastics in expanding cavities is modelled using the lattice Boltzmann method in two and three dimensions. These models combine the regularized Bingham model for viscoplastic with a free-interface algorithm. The latter is based on a modified immiscible lattice Boltzmann model in which one species is the fluid and the other one is considered as vacuum. The boundary conditions at the curved liquid-vacuum interface are met without any geometrical front reconstruction from a first-order Chapman-Enskog expansion. The numerical results obtained with these models are found in good agreement with available theoretical and numerical analysis. **Keywords:** Generalized LBE, free-surface phenomena,

interface boundary conditions, filling processes, Bingham viscoplastic model, regularized models (22 pages, 2001)

29. H. Neunzert

»Denn nichts ist für den Menschen als Menschen etwas wert, was er nicht mit Leidenschaft tun kann«

Vortrag anlässlich der Verleihung des Akademiepreises des Landes Rheinland-Pfalz am 21.11.2001

Was macht einen guten Hochschullehrer aus? Auf diese Frage gibt es sicher viele verschiedene, fachbezogene Antworten, aber auch ein paar allgemeine Gesichtspunkte: es bedarf der »Leidenschaft« für die Forschung (Max Weber), aus der dann auch die Begeisterung für die Lehre erwächst. Forschung und Lehre gehören zusammen, um die Wissenschaft als lebendiges Tun vermitteln zu können. Der Vortrag gibt Beispiele dafür, wie in angewandter Mathematik Forschungsaufgaben aus praktischen Alltagsproblemstellungen erwachsen, die in die Lehre auf verschiedenen Stufen (Gymnasium bis Graduiertenkolleg) einfließen; er leitet damit auch zu einem aktuellen Forschungsgebiet, der Mehrskalenanalyse mit ihren vielfältigen Anwendungen in Bildverarbeitung, Materialentwicklung und Strömungsmechanik über, was aber nur kurz gestreift wird. Mathematik erscheint hier als eine moderne Schlüsseltechnologie, die aber auch enge Beziehungen zu den Geistes- und Sozialwissenschaften hat.

Keywords: Lehre, Forschung, angewandte Mathematik, Mehrskalenanalyse, Strömungsmechanik (18 pages, 2001)

30. J. Kuhnert, S. Tiwari

Finite pointset method based on the projection method for simulations of the incompressible Navier-Stokes equations

A Lagrangian particle scheme is applied to the projection method for the incompressible Navier-Stokes equations. The approximation of spatial derivatives is obtained by the weighted least squares method. The pressure Poisson equation is solved by a local iterative procedure with the help of the least squares method. Numerical tests are performed for two dimensional cases. The Couette flow, Poiseuille flow, decaying shear flow and the driven cavity flow are presented. The numerical solutions are obtained for stationary as well as instationary cases and are compared with the analytical solutions for channel flows. Finally, the driven cavity in a unit square is considered and the stationary solution obtained from this scheme is compared with that from the finite element method.

Keywords: Incompressible Navier-Stokes equations, Meshfree method, Projection method, Particle scheme, Least squares approximation
AMS subject classification: 76D05, 76M28 (25 pages, 2001)

31. R. Korn, M. Krekel

Optimal Portfolios with Fixed Consumption or Income Streams

We consider some portfolio optimisation problems where either the investor has a desire for an a priori specified consumption stream or/and follows a deterministic pay in scheme while also trying to maximize expected utility from final wealth. We derive explicit closed form solutions for continuous and discrete monetary streams. The mathematical method used is classical stochastic control theory.

Keywords: Portfolio optimisation, stochastic control, HJB equation, discretisation of control problems. (23 pages, 2002)

32. M. Krekel

Optimal portfolios with a loan dependent credit spread

If an investor borrows money he generally has to pay higher interest rates than he would have received, if he had put his funds on a savings account. The classical model of continuous time portfolio optimisation ignores this effect. Since there is obviously a connection between the default probability and the total

percentage of wealth, which the investor is in debt, we study portfolio optimisation with a control dependent interest rate. Assuming a logarithmic and a power utility function, respectively, we prove explicit formulae of the optimal control.

Keywords: Portfolio optimisation, stochastic control, HJB equation, credit spread, log utility, power utility, non-linear wealth dynamics
(25 pages, 2002)

33. J. Ohser, W. Nagel, K. Schladitz

The Euler number of discretized sets - on the choice of adjacency in homogeneous lattices

Two approaches for determining the Euler-Poincaré characteristic of a set observed on lattice points are considered in the context of image analysis { the integral geometric and the polyhedral approach. Information about the set is assumed to be available on lattice points only. In order to retain properties of the Euler number and to provide a good approximation of the true Euler number of the original set in the Euclidean space, the appropriate choice of adjacency in the lattice for the set and its background is crucial. Adjacencies are defined using tessellations of the whole space into polyhedrons. In \mathbb{R}^3 , two new 14 adjacencies are introduced additionally to the well known 6 and 26 adjacencies. For the Euler number of a set and its complement, a consistency relation holds. Each of the pairs of adjacencies (14:1; 14:1), (14:2; 14:2), (6; 26), and (26; 6) is shown to be a pair of complementary adjacencies with respect to this relation. That is, the approximations of the Euler numbers are consistent if the set and its background (complement) are equipped with this pair of adjacencies. Furthermore, sufficient conditions for the correctness of the approximations of the Euler number are given. The analysis of selected microstructures and a simulation study illustrate how the estimated Euler number depends on the chosen adjacency. It also shows that there is not a uniquely best pair of adjacencies with respect to the estimation of the Euler number of a set in Euclidean space.

Keywords: image analysis, Euler number, neighborhood relationships, cuboidal lattice
(32 pages, 2002)

34. I. Ginzburg, K. Steiner

Lattice Boltzmann Model for Free-Surface flow and Its Application to Filling Process in Casting

A generalized lattice Boltzmann model to simulate free-surface is constructed in both two and three dimensions. The proposed model satisfies the interfacial boundary conditions accurately. A distinctive feature of the model is that the collision processes is carried out only on the points occupied partially or fully by the fluid. To maintain a sharp interfacial front, the method includes an anti-diffusion algorithm. The unknown distribution functions at the interfacial region are constructed according to the first order Chapman-Enskog analysis. The interfacial boundary conditions are satisfied exactly by the coefficients in the Chapman-Enskog expansion. The distribution functions are naturally expressed in the local interfacial coordinates. The macroscopic quantities at the interface are extracted from the least-square solutions of a locally linearized system obtained from the known distribution functions. The proposed method does not require any geometric front construction and is robust for any interfacial topology. Simulation results of realistic filling process are presented: rectangular cavity in two dimensions and Hammer box, Campbell box, Sheffield box, and Motorblock in three dimensions. To enhance the stability at high Reynolds numbers, various upwind-type schemes are developed. Free-slip and no-slip boundary conditions are also discussed.

Keywords: Lattice Boltzmann models; free-surface phenomena; interface boundary conditions; filling processes; injection molding; volume of fluid method; interface boundary conditions; advection-schemes; upwind-schemes
(54 pages, 2002)

35. M. Günther, A. Klar, T. Materne, R. Wegener

Multivalued fundamental diagrams and stop and go waves for continuum traffic equations

In the present paper a kinetic model for vehicular traffic leading to multivalued fundamental diagrams is developed and investigated in detail. For this model phase transitions can appear depending on the local density and velocity of the flow. A derivation of associated macroscopic traffic equations from the kinetic equation is given. Moreover, numerical experiments show the appearance of stop and go waves for high-way traffic with a bottleneck.

Keywords: traffic flow, macroscopic equations, kinetic derivation, multivalued fundamental diagram, stop and go waves, phase transitions
(25 pages, 2002)

36. S. Feldmann, P. Lang, D. Prätzel-Wolters

Parameter influence on the zeros of network determinants

To a network $N(q)$ with determinant $D(s;q)$ depending on a parameter vector $q \in \mathbb{R}^r$ via identification of some of its vertices, a network $N^\wedge(q)$ is assigned. The paper deals with procedures to find $N^\wedge(q)$, such that its determinant $D^\wedge(s;q)$ admits a factorization in the determinants of appropriate subnetworks, and with the estimation of the deviation of the zeros of D^\wedge from the zeros of D . To solve the estimation problem state space methods are applied.

Keywords: Networks, Equicofactor matrix polynomials, Realization theory, Matrix perturbation theory
(30 pages, 2002)

37. K. Koch, J. Ohser, K. Schladitz

Spectral theory for random closed sets and estimating the covariance via frequency space

A spectral theory for stationary random closed sets is developed and provided with a sound mathematical basis. Definition and proof of existence of the Bartlett spectrum of a stationary random closed set as well as the proof of a Wiener-Khintchine theorem for the power spectrum are used to two ends: First, well known second order characteristics like the covariance can be estimated faster than usual via frequency space. Second, the Bartlett spectrum and the power spectrum can be used as second order characteristics in frequency space. Examples show, that in some cases information about the random closed set is easier to obtain from these characteristics in frequency space than from their real world counterparts.

Keywords: Random set, Bartlett spectrum, fast Fourier transform, power spectrum
(28 pages, 2002)

38. D. d'Humières, I. Ginzburg

Multi-reflection boundary conditions for lattice Boltzmann models

We present a unified approach of several boundary conditions for lattice Boltzmann models. Its general framework is a generalization of previously introduced schemes such as the bounce-back rule, linear or quadratic interpolations, etc. The objectives are two fold: first to give theoretical tools to study the existing boundary conditions and their corresponding accuracy; secondly to design formally third-order accurate boundary conditions for general flows. Using these boundary conditions, Couette and Poiseuille flows are exact solution of the lattice Boltzmann models for a Reynolds number $Re = 0$ (Stokes limit).

Numerical comparisons are given for Stokes flows in periodic arrays of spheres and cylinders, linear periodic array of cylinders between moving plates and for Navier-Stokes flows in periodic arrays of cylinders for $Re < 200$. These results show a significant improvement of the overall accuracy when using the linear interpolations instead of the bounce-back reflection (up to an order of magnitude on the hydrodynamics fields). Further improvement is achieved with the new multi-reflection boundary conditions, reaching a

level of accuracy close to the quasi-analytical reference solutions, even for rather modest grid resolutions and few points in the narrowest channels. More important, the pressure and velocity fields in the vicinity of the obstacles are much smoother with multi-reflection than with the other boundary conditions.

Finally the good stability of these schemes is highlighted by some simulations of moving obstacles: a cylinder between flat walls and a sphere in a cylinder.

Keywords: lattice Boltzmann equation, boundary conditions, bounce-back rule, Navier-Stokes equation
(72 pages, 2002)

39. R. Korn

Elementare Finanzmathematik

Im Rahmen dieser Arbeit soll eine elementar gehaltene Einführung in die Aufgabenstellungen und Prinzipien der modernen Finanzmathematik gegeben werden. Insbesondere werden die Grundlagen der Modellierung von Aktienkursen, der Bewertung von Optionen und der Portfolio-Optimierung vorgestellt. Natürlich können die verwendeten Methoden und die entwickelte Theorie nicht in voller Allgemeinheit für den Schulunterricht verwendet werden, doch sollen einzelne Prinzipien so herausgearbeitet werden, dass sie auch an einfachen Beispielen verstanden werden können.

Keywords: Finanzmathematik, Aktien, Optionen, Portfolio-Optimierung, Börse, Lehrerweiterbildung, Mathematikunterricht
(98 pages, 2002)

40. J. Kallrath, M. C. Müller, S. Nickel

Batch Presorting Problems: Models and Complexity Results

In this paper we consider short term storage systems. We analyze presorting strategies to improve the efficiency of these storage systems. The presorting task is called Batch PreSorting Problem (BPSP). The BPSP is a variation of an assignment problem, i.e., it has an assignment problem kernel and some additional constraints. We present different types of these presorting problems, introduce mathematical programming formulations and prove the NP-completeness for one type of the BPSP. Experiments are carried out in order to compare the different model formulations and to investigate the behavior of these models.

Keywords: Complexity theory, Integer programming, Assignment, Logistics
(19 pages, 2002)

41. J. Linn

On the frame-invariant description of the phase space of the Folgar-Tucker equation

The Folgar-Tucker equation is used in flow simulations of fiber suspensions to predict fiber orientation depending on the local flow. In this paper, a complete, frame-invariant description of the phase space of this differential equation is presented for the first time.

Key words: fiber orientation, Folgar-Tucker equation, injection molding
(5 pages, 2003)

42. T. Hanne, S. Nickel

A Multi-Objective Evolutionary Algorithm for Scheduling and Inspection Planning in Software Development Projects

In this article, we consider the problem of planning inspections and other tasks within a software development (SD) project with respect to the objectives quality (no. of defects), project duration, and costs. Based on a discrete-event simulation model of SD processes comprising the phases coding, inspection, test, and rework, we present a simplified formulation of the problem as a multiobjective optimization problem. For solving the problem (i.e. finding an approximation of the efficient set) we develop a multiobjective evolutionary algorithm. Details of the algorithm are discussed as well as results of its application to sample problems.

Key words: multiple objective programming, project management and scheduling, software development, evolutionary algorithms, efficient set
(29 pages, 2003)

43. T. Bortfeld, J. Küfer, M. Monz, A. Scherrer, C. Thieke, H. Trinka

Intensity-Modulated Radiotherapy - A Large Scale Multi-Criteria Programming Problem -

Radiation therapy planning is always a tight rope walk between dangerous insufficient dose in the target volume and life threatening overdosing of organs at risk. Finding ideal balances between these inherently contradictory goals challenges dosimetrists and physicians in their daily practice. Today's planning systems are typically based on a single evaluation function that measures the quality of a radiation treatment plan. Unfortunately, such a one dimensional approach cannot satisfactorily map the different backgrounds of physicians and the patient dependent necessities. So, too often a time consuming iteration process between evaluation of dose distribution and redefinition of the evaluation function is needed.

In this paper we propose a generic multi-criteria approach based on Pareto's solution concept. For each entity of interest - target volume or organ at risk a structure dependent evaluation function is defined measuring deviations from ideal doses that are calculated from statistical functions. A reasonable bunch of clinically meaningful Pareto optimal solutions are stored in a data base, which can be interactively searched by physicians. The system guarantees dynamical planning as well as the discussion of tradeoffs between different entities.

Mathematically, we model the upcoming inverse problem as a multi-criteria linear programming problem. Because of the large scale nature of the problem it is not possible to solve the problem in a 3D-setting without adaptive reduction by appropriate approximation schemes.

Our approach is twofold: First, the discretization of the continuous problem is based on an adaptive hierarchical clustering process which is used for a local refinement of constraints during the optimization procedure. Second, the set of Pareto optimal solutions is approximated by an adaptive grid of representatives that are found by a hybrid process of calculating extreme compromises and interpolation methods.

Keywords: multiple criteria optimization, representative systems of Pareto solutions, adaptive triangulation, clustering and disaggregation techniques, visualization of Pareto solutions, medical physics, external beam radiotherapy planning, intensity modulated radiotherapy
(31 pages, 2003)

44. T. Halfmann, T. Wichmann

Overview of Symbolic Methods in Industrial Analog Circuit Design

Industrial analog circuits are usually designed using numerical simulation tools. To obtain a deeper circuit understanding, symbolic analysis techniques can additionally be applied. Approximation methods which reduce the complexity of symbolic expressions are needed in order to handle industrial-sized problems. This paper will give an overview to the field of symbolic analog circuit analysis. Starting with a motivation, the state-of-the-art simplification algorithms for linear as well as for nonlinear circuits are presented. The basic ideas behind the different techniques are described, whereas the technical details can be found in the cited references. Finally, the application of linear and nonlinear symbolic analysis will be shown on two example circuits.

Keywords: CAD, automated analog circuit design, symbolic analysis, computer algebra, behavioral modeling, system simulation, circuit sizing, macro modeling, differential-algebraic equations, index
(17 pages, 2003)

45. S. E. Mikhailov, J. Orlik

Asymptotic Homogenisation in Strength and Fatigue Durability Analysis of Composites

Asymptotic homogenisation technique and two-scale convergence is used for analysis of macro-strength and fatigue durability of composites with a periodic structure under cyclic loading. The linear damage accumulation rule is employed in the phenomenologi-

cal micro-durability conditions (for each component of the composite) under varying cyclic loading. Both local and non-local strength and durability conditions are analysed. The strong convergence of the strength and fatigue damage measure as the structure period tends to zero is proved and their limiting values are estimated.
Keywords: multiscale structures, asymptotic homogenization, strength, fatigue, singularity, non-local conditions
(14 pages, 2003)

46. P. Domínguez-Marín, P. Hansen, N. Mladenović, S. Nickel

Heuristic Procedures for Solving the Discrete Ordered Median Problem

We present two heuristic methods for solving the Discrete Ordered Median Problem (DOMP), for which no such approaches have been developed so far. The DOMP generalizes classical discrete facility location problems, such as the p-median, p-center and Uncapacitated Facility Location problems. The first procedure proposed in this paper is based on a genetic algorithm developed by Moreno Vega [MV96] for p-median and p-center problems. Additionally, a second heuristic approach based on the Variable Neighborhood Search metaheuristic (VNS) proposed by Hansen & Mladenović [HM97] for the p-median problem is described. An extensive numerical study is presented to show the efficiency of both heuristics and compare them.

Keywords: genetic algorithms, variable neighborhood search, discrete facility location
(31 pages, 2003)

47. N. Boland, P. Domínguez-Marín, S. Nickel, J. Puerto

Exact Procedures for Solving the Discrete Ordered Median Problem

The Discrete Ordered Median Problem (DOMP) generalizes classical discrete location problems, such as the N-median, N-center and Uncapacitated Facility Location problems. It was introduced by Nickel [16], who formulated it as both a nonlinear and a linear integer program. We propose an alternative integer linear programming formulation for the DOMP, discuss relationships between both integer linear programming formulations, and show how properties of optimal solutions can be used to strengthen these formulations. Moreover, we present a specific branch and bound procedure to solve the DOMP more efficiently. We test the integer linear programming formulations and this branch and bound method computationally on randomly generated test problems.

Keywords: discrete location, Integer programming
(41 pages, 2003)

48. S. Feldmann, P. Lang

Padé-like reduction of stable discrete linear systems preserving their stability

A new stability preserving model reduction algorithm for discrete linear SISO-systems based on their impulse response is proposed. Similar to the Padé approximation, an equation system for the Markov parameters involving the Hankel matrix is considered, that here however is chosen to be of very high dimension. Although this equation system therefore in general cannot be solved exactly, it is proved that the approximate solution, computed via the Moore-Penrose inverse, gives rise to a stability preserving reduction scheme, a property that cannot be guaranteed for the Padé approach. Furthermore, the proposed algorithm is compared to another stability preserving reduction approach, namely the balanced truncation method, showing comparable performance of the reduced systems. The balanced truncation method however starts from a state space description of the systems and in general is expected to be more computational demanding.

Keywords: Discrete linear systems, model reduction, stability, Hankel matrix, Stein equation
(16 pages, 2003)

49. J. Kallrath, S. Nickel

A Polynomial Case of the Batch Presorting Problem

This paper presents new theoretical results for a special case of the batch presorting problem (BPSP). We will show that this case can be solved in polynomial time. Offline and online algorithms are presented for solving the BPSP. Competitive analysis is used for comparing the algorithms.

Keywords: batch presorting problem, online optimization, competitive analysis, polynomial algorithms, logistics
(17 pages, 2003)

50. T. Hanne, H. L. Trinka

knowCube for MCDM – Visual and Interactive Support for Multicriteria Decision Making

In this paper, we present a novel multicriteria decision support system (MCDSS), called knowCube, consisting of components for knowledge organization, generation, and navigation. Knowledge organization rests upon a database for managing qualitative and quantitative criteria, together with add-on information. Knowledge generation serves filling the database via e.g. identification, optimization, classification or simulation. For "finding needles in haystacks", the knowledge navigation component supports graphical database retrieval and interactive, goal-oriented problem solving. Navigation "helpers" are, for instance, cascading criteria aggregations, modifiable metrics, ergonomic interfaces, and customizable visualizations. Examples from real-life projects, e.g. in industrial engineering and in the life sciences, illustrate the application of our MCDSS.

Key words: Multicriteria decision making, knowledge management, decision support systems, visual interfaces, interactive navigation, real-life applications.
(26 pages, 2003)

51. O. Iliev, V. Laptev

On Numerical Simulation of Flow Through Oil Filters

This paper concerns numerical simulation of flow through oil filters. Oil filters consist of filter housing (filter box), and a porous filtering medium, which completely separates the inlet from the outlet. We discuss mathematical models, describing coupled flows in the pure liquid subregions and in the porous filter media, as well as interface conditions between them. Further, we reformulate the problem in fictitious regions method manner, and discuss peculiarities of the numerical algorithm in solving the coupled system. Next, we show numerical results, validating the model and the algorithm. Finally, we present results from simulation of 3-D oil flow through a real car filter.

Keywords: oil filters, coupled flow in plain and porous media, Navier-Stokes, Brinkman, numerical simulation
(8 pages, 2003)

52. W. Dörfler, O. Iliev, D. Stoyanov, D. Vassileva

On a Multigrid Adaptive Refinement Solver for Saturated Non-Newtonian Flow in Porous Media

A multigrid adaptive refinement algorithm for non-Newtonian flow in porous media is presented. The saturated flow of a non-Newtonian fluid is described by the continuity equation and the generalized Darcy law. The resulting second order nonlinear elliptic equation is discretized by a finite volume method on a cell-centered grid. A nonlinear full-multigrid, full-approximation-storage algorithm is implemented. As a smoother, a single grid solver based on Picard linearization and Gauss-Seidel relaxation is used. Further, a local refinement multigrid algorithm on a composite grid is developed. A residual based error indicator is used in the adaptive refinement criterion. A special implementation approach is used, which allows us to perform unstructured local refinement in conjunction with the finite volume discretization. Several results from numerical experiments are presented in order to examine the performance of the solver.

Keywords: Nonlinear multigrid, adaptive refinement, non-Newtonian flow in porous media
(17 pages, 2003)

53. S. Kruse

On the Pricing of Forward Starting Options under Stochastic Volatility

We consider the problem of pricing European forward starting options in the presence of stochastic volatility. By performing a change of measure using the asset price at the time of strike determination as a numeraire, we derive a closed-form solution based on Heston's model of stochastic volatility.

Keywords: Option pricing, forward starting options, Heston model, stochastic volatility, cliquet options (11 pages, 2003)

54. O. Iliev, D. Stoyanov

Multigrid – adaptive local refinement solver for incompressible flows

A non-linear multigrid solver for incompressible Navier-Stokes equations, exploiting finite volume discretization of the equations, is extended by adaptive local refinement. The multigrid is the outer iterative cycle, while the SIMPLE algorithm is used as a smoothing procedure. Error indicators are used to define the refinement subdomain. A special implementation approach is used, which allows to perform unstructured local refinement in conjunction with the finite volume discretization. The multigrid - adaptive local refinement algorithm is tested on 2D Poisson equation and further is applied to a lid-driven flows in a cavity (2D and 3D case), comparing the results with bench-mark data. The software design principles of the solver are also discussed.

Keywords: Navier-Stokes equations, incompressible flow, projection-type splitting, SIMPLE, multigrid methods, adaptive local refinement, lid-driven flow in a cavity (37 pages, 2003)

55. V. Starikovicius

The multiphase flow and heat transfer in porous media

In first part of this work, summaries of traditional Multiphase Flow Model and more recent Multiphase Mixture Model are presented. Attention is being paid to attempts include various heterogeneous aspects into models. In second part, MMM based differential model for two-phase immiscible flow in porous media is considered. A numerical scheme based on the sequential solution procedure and control volume based finite difference schemes for the pressure and saturation-conservation equations is developed. A computer simulator is built, which exploits object-oriented programming techniques. Numerical result for several test problems are reported.

Keywords: Two-phase flow in porous media, various formulations, global pressure, multiphase mixture model, numerical simulation (30 pages, 2003)

56. P. Lang, A. Sarishvili, A. Wirsén

Blocked neural networks for knowledge extraction in the software development process

One of the main goals of an organization developing software is to increase the quality of the software while at the same time to decrease the costs and the duration of the development process. To achieve this, various decisions affecting this goal before and during the development process have to be made by the managers. One appropriate tool for decision support are simulation models of the software life cycle, which also help to understand the dynamics of the software development process. Building up a simulation model requires a mathematical description of the interactions between different objects involved in the development process. Based on experimental data, techniques from the field of knowledge discovery can be used to quantify these interactions and to generate new process knowledge based on the analysis of the determined relationships. In this paper blocked neuronal networks and related relevance measures will be presented as an appropriate tool for quantification and validation of qualitatively known dependencies in the software development process.

Keywords: Blocked Neural Networks, Nonlinear Regression, Knowledge Extraction, Code Inspection (21 pages, 2003)

57. H. Knaf, P. Lang, S. Zeiser

Diagnosis aiding in Regulation Thermography using Fuzzy Logic

The objective of the present article is to give an overview of an application of Fuzzy Logic in Regulation Thermography, a method of medical diagnosis support. An introduction to this method of the complementary medical science based on temperature measurements – so-called thermograms – is provided. The process of modelling the physician's thermogram evaluation rules using the calculus of Fuzzy Logic is explained.

Keywords: fuzzy logic, knowledge representation, expert system (22 pages, 2003)

58. M.T. Melo, S. Nickel, F. Saldanha da Gama

Largescale models for dynamic multi-commodity capacitated facility location

In this paper we focus on the strategic design of supply chain networks. We propose a mathematical modeling framework that captures many practical aspects of network design problems simultaneously but which have not received adequate attention in the literature. The aspects considered include: dynamic planning horizon, generic supply chain network structure, external supply of materials, inventory opportunities for goods, distribution of commodities, facility configuration, availability of capital for investments, and storage limitations. Moreover, network configuration decisions concerning the gradual relocation of facilities over the planning horizon are considered. To cope with fluctuating demands, capacity expansion and reduction scenarios are also analyzed as well as modular capacity shifts. The relation of the proposed modeling framework with existing models is discussed. For problems of reasonable size we report on our computational experience with standard mathematical programming software. In particular, useful insights on the impact of various factors on network design decisions are provided.

Keywords: supply chain management, strategic planning, dynamic location, modeling (40 pages, 2003)

59. J. Orlik

Homogenization for contact problems with periodically rough surfaces

We consider the contact of two elastic bodies with rough surfaces at the interface. The size of the micro-peaks and valleys is very small compared with the macroscale of the bodies' domains. This makes the direct application of the FEM for the calculation of the contact problem prohibitively costly. A method is developed that allows deriving a macrocontact condition on the interface. The method involves the two-scale asymptotic homogenization procedure that takes into account the microgeometry of the interface layer and the stiffnesses of materials of both domains. The macrocontact condition can then be used in a FEM model for the contact problem on the macrolevel. The averaged contact stiffness obtained allows the replacement of the interface layer in the macromodel by the macrocontact condition.

Keywords: asymptotic homogenization, contact problems (28 pages, 2004)

60. A. Scherrer, K.-H. Küfer, M. Monz, F. Alonso, T. Bortfeld

IMRT planning on adaptive volume structures – a significant advance of computational complexity

In intensity-modulated radiotherapy (IMRT) planning the oncologist faces the challenging task of finding a treatment plan that he considers to be an ideal compromise of the inherently contradictory goals of delivering a sufficiently high dose to the target while widely sparing critical structures. The search for this a priori unknown compromise typically requires the computation of several plans, i.e. the solution of several optimization problems. This accumulates to a high computational expense due to the large scale of these problems – a consequence of the discrete problem formulation. This paper presents the adaptive clustering method as a new algorithmic concept to overcome these difficulties.

The computations are performed on an individually adapted structure of voxel clusters rather than on the original voxels leading to a decisively reduced computational complexity as numerical examples on real clinical data demonstrate. In contrast to many other similar concepts, the typical trade-off between a reduction in computational complexity and a loss in exactness can be avoided: the adaptive clustering method produces the optimum of the original problem. This flexible method can be applied to both single- and multi-criteria optimization methods based on most of the convex evaluation functions used in practice.

Keywords: Intensity-modulated radiation therapy (IMRT), inverse treatment planning, adaptive volume structures, hierarchical clustering, local refinement, adaptive clustering, convex programming, mesh generation, multi-grid methods (24 pages, 2004)

61. D. Kehrwald

Parallel lattice Boltzmann simulation of complex flows

After a short introduction to the basic ideas of lattice Boltzmann methods and a brief description of a modern parallel computer, it is shown how lattice Boltzmann schemes are successfully applied for simulating fluid flow in microstructures and calculating material properties of porous media. It is explained how lattice Boltzmann schemes compute the gradient of the velocity field without numerical differentiation. This feature is then utilised for the simulation of pseudo-plastic fluids, and numerical results are presented for a simple benchmark problem as well as for the simulation of liquid composite moulding.

Keywords: Lattice Boltzmann methods, parallel computing, microstructure simulation, virtual material design, pseudo-plastic fluids, liquid composite moulding (12 pages, 2004)

62. O. Iliev, J. Linn, M. Moog, D. Niedziela, V. Starikovicius

On the Performance of Certain Iterative Solvers for Coupled Systems Arising in Discretization of Non-Newtonian Flow Equations

Iterative solution of large scale systems arising after discretization and linearization of the unsteady non-Newtonian Navier–Stokes equations is studied. cross WLF model is used to account for the non-Newtonian behavior of the fluid. Finite volume method is used to discretize the governing system of PDEs. Viscosity is treated explicitly (e.g., it is taken from the previous time step), while other terms are treated implicitly. Different preconditioners (block-diagonal, block-triangular, relaxed incomplete LU factorization, etc.) are used in conjunction with advanced iterative methods, namely, BiCGStab, CGS, GMRES. The action of the preconditioner in fact requires inverting different blocks. For this purpose, in addition to preconditioned BiCGStab, CGS, GMRES, we use also algebraic multigrid method (AMG). The performance of the iterative solvers is studied with respect to the number of unknowns, characteristic velocity in the basic flow, time step, deviation from Newtonian behavior, etc. Results from numerical experiments are presented and discussed.

Keywords: Performance of iterative solvers, Preconditioners, Non-Newtonian flow (17 pages, 2004)

63. R. Ciegis, O. Iliev, S. Rief, K. Steiner

On Modelling and Simulation of Different Regimes for Liquid Polymer Moulding

In this paper we consider numerical algorithms for solving a system of nonlinear PDEs arising in modeling of liquid polymer injection. We investigate the particular case when a porous preform is located within the mould, so that the liquid polymer flows through a porous medium during the filling stage. The nonlinearity of the governing system of PDEs is due to the non-Newtonian behavior of the polymer, as well as due to the moving free boundary. The latter is related to the penetration front and a Stefan type problem is formulated to account for it. A finite-volume method is used

to approximate the given differential problem. Results of numerical experiments are presented.

We also solve an inverse problem and present algorithms for the determination of the absolute preform permeability coefficient in the case when the velocity of the penetration front is known from measurements. In both cases (direct and inverse problems) we emphasize on the specifics related to the non-Newtonian behavior of the polymer. For completeness, we discuss also the Newtonian case. Results of some experimental measurements are presented and discussed.

Keywords: *Liquid Polymer Moulding, Modelling, Simulation, Infiltration, Front Propagation, non-Newtonian flow in porous media* (43 pages, 2004)

64. T. Hanne, H. Neu

Simulating Human Resources in Software Development Processes

In this paper, we discuss approaches related to the explicit modeling of human beings in software development processes. While in most older simulation models of software development processes, esp. those of the system dynamics type, humans are only represented as a labor pool, more recent models of the discrete-event simulation type require representations of individual humans. In that case, particularities regarding the person become more relevant. These individual effects are either considered as stochastic variations of productivity, or an explanation is sought based on individual characteristics, such as skills for instance. In this paper, we explore such possibilities by recurring to some basic results in psychology, sociology, and labor science. Various specific models for representing human effects in software process simulation are discussed.

Keywords: *Human resource modeling, software process, productivity, human factors, learning curve* (14 pages, 2004)

65. O. Iliev, A. Mikelic, P. Popov

Fluid structure interaction problems in deformable porous media: Toward permeability of deformable porous media

In this work the problem of fluid flow in deformable porous media is studied. First, the stationary fluid-structure interaction (FSI) problem is formulated in terms of incompressible Newtonian fluid and a linearized elastic solid. The flow is assumed to be characterized by very low Reynolds number and is described by the Stokes equations. The strains in the solid are small allowing for the solid to be described by the Lamé equations, but no restrictions are applied on the magnitude of the displacements leading to strongly coupled, nonlinear fluid-structure problem. The FSI problem is then solved numerically by an iterative procedure which solves sequentially fluid and solid subproblems. Each of the two subproblems is discretized by finite elements and the fluid-structure coupling is reduced to an interface boundary condition. Several numerical examples are presented and the results from the numerical computations are used to perform permeability computations for different geometries.

Keywords: *fluid-structure interaction, deformable porous media, upscaling, linear elasticity, stokes, finite elements* (28 pages, 2004)

66. F. Gaspar, O. Iliev, F. Lisbona, A. Naumovich, P. Vabishchevich

On numerical solution of 1-D poroelasticity equations in a multilayered domain

Finite volume discretization of Biot system of poroelasticity in a multilayered domain is presented. Staggered grid is used in order to avoid nonphysical oscillations of the numerical solution, appearing when a collocated grid is used. Various numerical experiments are presented in order to illustrate the accuracy of the finite difference scheme. In the first group of experiments, problems having analytical solutions are solved, and the order of convergence for the velocity, the pressure, the displacements, and the stresses is analyzed. In the second group of experiments numerical solution of real problems is presented.

Keywords: *poroelasticity, multilayered material, finite volume discretization, MAC type grid* (41 pages, 2004)

67. J. Ohser, K. Schladitz, K. Koch, M. Nöthe

Diffraction by image processing and its application in materials science

A spectral theory for constituents of macroscopically homogeneous random microstructures modeled as homogeneous random closed sets is developed and provided with a sound mathematical basis, where the spectrum obtained by Fourier methods corresponds to the angular intensity distribution of x-rays scattered by this constituent. It is shown that the fast Fourier transform applied to three-dimensional images of microstructures obtained by micro-tomography is a powerful tool of image processing. The applicability of this technique is demonstrated in the analysis of images of porous media.

Keywords: *porous microstructure, image analysis, random set, fast Fourier transform, power spectrum, Bartlett spectrum* (13 pages, 2004)

68. H. Neunzert

Mathematics as a Technology: Challenges for the next 10 Years

No doubt: Mathematics has become a technology in its own right, maybe even a key technology. Technology may be defined as the application of science to the problems of commerce and industry. And science? Science maybe defined as developing, testing and improving models for the prediction of system behavior; the language used to describe these models is mathematics and mathematics provides methods to evaluate these models. Here we are! Why has mathematics become a technology only recently? Since it got a tool, a tool to evaluate complex, "near to reality" models: Computer! The model may be quite old – Navier-Stokes equations describe flow behavior rather well, but to solve these equations for realistic geometry and higher Reynolds numbers with sufficient precision is even for powerful parallel computing a real challenge. Make the models as simple as possible, as complex as necessary – and then evaluate them with the help of efficient and reliable algorithms: These are genuine mathematical tasks. **Keywords:** *applied mathematics, technology, modelling, simulation, visualization, optimization, glass processing, spinning processes, fiber-fluid interaction, turbulence effects, topological optimization, multicriteria optimization, Uncertainty and Risk, financial mathematics, Malliavin calculus, Monte-Carlo methods, virtual material design, filtration, bio-informatics, system biology* (29 pages, 2004)

69. R. Ewing, O. Iliev, R. Lazarov, A. Naumovich

On convergence of certain finite difference discretizations for 1D poroelasticity interface problems

Finite difference discretizations of 1D poroelasticity equations with discontinuous coefficients are analyzed. A recently suggested FD discretization of poroelasticity equations with constant coefficients on staggered grid, [5], is used as a basis. A careful treatment of the interfaces leads to harmonic averaging of the discontinuous coefficients. Here, convergence for the pressure and for the displacement is proven in certain norms for the scheme with harmonic averaging (HA). Order of convergence 1.5 is proven for arbitrary located interface, and second order convergence is proven for the case when the interface coincides with a grid node. Furthermore, following the ideas from [3], modified HA discretization are suggested for particular cases. The velocity and the stress are approximated with second order on the interface in this case. It is shown that for wide class of problems, the modified discretization provides better accuracy. Second order convergence for modified scheme is proven for the case when the interface coincides with a displacement grid node. Numerical experiments are presented in order to illustrate our considerations.

Keywords: *poroelasticity, multilayered material, finite volume discretizations, MAC type grid, error estimates* (26 pages, 2004)

70. W. Dörfler, O. Iliev, D. Stoyanov, D. Vassileva

On Efficient Simulation of Non-Newtonian Flow in Saturated Porous Media with a Multigrid Adaptive Refinement Solver

Flow of non-Newtonian in saturated porous media can be described by the continuity equation and the generalized Darcy law. Efficient solution of the resulting second order nonlinear elliptic equation is discussed here. The equation is discretized by a finite volume method on a cell-centered grid. Local adaptive refinement of the grid is introduced in order to reduce the number of unknowns. A special implementation approach is used, which allows us to perform unstructured local refinement in conjunction with the finite volume discretization. Two residual based error indicators are exploited in the adaptive refinement criterion. Second order accurate discretization on the interfaces between refined and non-refined subdomains, as well as on the boundaries with Dirichlet boundary condition, are presented here, as an essential part of the accurate and efficient algorithm. A nonlinear full approximation storage multigrid algorithm is developed especially for the above described composite (coarse plus locally refined) grid approach. In particular, second order approximation around interfaces is a result of a quadratic approximation of slave nodes in the multigrid - adaptive refinement (MG-AR) algorithm. Results from numerical solution of various academic and practice-induced problems are presented and the performance of the solver is discussed.

Keywords: *Nonlinear multigrid, adaptive refinement, non-Newtonian in porous media* (25 pages, 2004)

71. J. Kalcsics, S. Nickel, M. Schröder

Towards a Unified Territory Design Approach – Applications, Algorithms and GIS Integration

Territory design may be viewed as the problem of grouping small geographic areas into larger geographic clusters called territories in such a way that the latter are acceptable according to relevant planning criteria. In this paper we review the existing literature for applications of territory design problems and solution approaches for solving these types of problems. After identifying features common to all applications we introduce a basic territory design model and present in detail two approaches for solving this model: a classical location-allocation approach combined with optimal split resolution techniques and a newly developed computational geometry based method. We present computational results indicating the efficiency and suitability of the latter method for solving large-scale practical problems in an interactive environment. Furthermore, we discuss extensions to the basic model and its integration into Geographic Information Systems.

Keywords: *territory design, political districting, sales territory alignment, optimization algorithms, Geographical Information Systems* (40 pages, 2005)

72. K. Schladitz, S. Peters, D. Reinelt-Bitzer, A. Wiegmann, J. Ohser

Design of acoustic trim based on geometric modeling and flow simulation for non-woven

In order to optimize the acoustic properties of a stacked fiber non-woven, the microstructure of the non-woven is modeled by a macroscopically homogeneous random system of straight cylinders (tubes). That is, the fibers are modeled by a spatially stationary random system of lines (Poisson line process), dilated by a sphere. Pressing the non-woven causes anisotropy. In our model, this anisotropy is described by a one parametric distribution of the direction of the fibers. In the present application, the anisotropy parameter has to be estimated from 2d reflected light microscopic images of microsections of the non-woven.

After fitting the model, the flow is computed in digitized realizations of the stochastic geometric model using the lattice Boltzmann method. Based on the flow resistivity, the formulas of Delany and Bazley predict the frequency-dependent acoustic absorption of the non-woven in the impedance tube.

Using the geometric model, the description of a non-woven with improved acoustic absorption properties is obtained in the following way: First, the fiber thicknesses, porosity and anisotropy of the fiber system are modified. Then the flow and acoustics simulations are performed in the new sample. These two steps are repeated for various sets of parameters. Finally, the set of parameters for the geometric model leading to the best acoustic absorption is chosen.

Keywords: random system of fibers, Poisson line process, flow resistivity, acoustic absorption, Lattice-Boltzmann method, non-woven
(21 pages, 2005)

73. V. Rutka, A. Wiegmann

Explicit Jump Immersed Interface Method for virtual material design of the effective elastic moduli of composite materials

Virtual material design is the microscopic variation of materials in the computer, followed by the numerical evaluation of the effect of this variation on the material's macroscopic properties. The goal of this procedure is an in some sense improved material. Here, we give examples regarding the dependence of the effective elastic moduli of a composite material on the geometry of the shape of an inclusion. A new approach on how to solve such interface problems avoids mesh generation and gives second order accurate results even in the vicinity of the interface.

The Explicit Jump Immersed Interface Method is a finite difference method for elliptic partial differential equations that works on an equidistant Cartesian grid in spite of non-grid aligned discontinuities in equation parameters and solution. Near discontinuities, the standard finite difference approximations are modified by adding correction terms that involve jumps in the function and its derivatives. This work derives the correction terms for two dimensional linear elasticity with piecewise constant coefficients, i.e. for composite materials. It demonstrates numerically convergence and approximation properties of the method.

Keywords: virtual material design, explicit jump immersed interface method, effective elastic moduli, composite materials
(22 pages, 2005)

74. T. Hanne

Eine Übersicht zum Scheduling von Baustellen

Im diesem Dokument werden Aspekte der formalen zeitlichen Planung bzw. des Scheduling für Bauprojekte anhand ausgewählter Literatur diskutiert. Auf allgemeine Aspekte des Scheduling soll dabei nicht eingegangen werden. Hierzu seien als Standard-Referenzen nur Brucker (2004) und Pinedo (1995) genannt. Zu allgemeinen Fragen des Projekt-Managements sei auf Kerzner (2003) verwiesen.

Im Abschnitt 1 werden einige Anforderungen und Besonderheiten der Planung von Baustellen diskutiert. Diese treten allerdings auch in zahlreichen anderen Bereichen der Produktionsplanung und des Projektmanagements auf. In Abschnitt 2 werden dann Aspekte zur Formalisierung von Scheduling-Problemen in der Bauwirtschaft diskutiert, insbesondere Ziele und zu berücksichtigende Restriktionen. Auf eine mathematische Formalisierung wird dabei allerdings verzichtet. Abschnitt 3 bietet eine Übersicht über Verfahren und grundlegende Techniken für die Berechnung von Schedules. In Abschnitt 4 wird ein Überblick über vorhandene Software, zum einen verbreitete Internationale Software, zum anderen deutschsprachige Branchenlösungen, gegeben. Anschließend werden Schlussfolgerungen gezogen und es erfolgt eine Auflistung der Literaturquellen.

Keywords: Projektplanung, Scheduling, Bauplanung, Bauindustrie
(32 pages, 2005)

75. J. Linn

The Folgar–Tucker Model as a Differential Algebraic System for Fiber Orientation Calculation

The Folgar–Tucker equation (FTE) is the model most frequently used for the prediction of fiber orientation (FO) in simulations of the injection molding process for short-fiber reinforced thermoplasts. In contrast to its

widespread use in injection molding simulations, little is known about the mathematical properties of the FTE: an investigation of e.g. its phase space M_{FT} has been presented only recently [12]. The restriction of the dependent variable of the FTE to the set M_{FT} turns the FTE into a differential algebraic system (DAS), a fact which is commonly neglected when devising numerical schemes for the integration of the FTE. In this article we present some recent results on the problem of trace stability as well as some introductory material which complements our recent paper [12].

Keywords: fiber orientation, Folgar–Tucker model, invariants, algebraic constraints, phase space, trace stability
(15 pages, 2005)

76. M. Speckert, K. Dreßler, H. Mauch, A. Lion, G. J. Wierda

Simulation eines neuartigen Prüfsystems für Achserproben durch MKS-Modellierung einschließlich Regelung

Testing new suspensions based on real load data is performed on elaborate multi channel test rigs. Usually, wheel forces and moments measured during driving maneuvers are reproduced by the test rig. Because of the complicated interaction between test rig and suspension each new rig configuration has to prove its efficiency with respect to the requirements and the configuration might be subject to optimization.

This paper deals with mathematical and physical modeling of a new concept of a test rig which is based on two hexapods. The model contains the geometric configuration as well as the hydraulics and the controller. It is implemented as an ADAMS/Car template and can be combined with different suspension models to get a complete assembly representing the entire test rig. Using this model, all steps required for a real test run such as controller adaptation, drive file iteration and simulation can be performed. Geometric or hydraulic parameters can be modified easily to improve the setup and adapt the system to the suspension and the given load data.

The model supports and accompanies the introduction of the new rig concept and can be used to prepare real tests on a virtual basis. Using both a front and a rear suspension the approach is described and the potentials coming with the simulation are pointed out.

Keywords: virtual test rig, suspension testing, multi-body simulation, modeling hexapod test rig, optimization of test rig configuration
(20 pages, 2005)

In deutscher Sprache; bereits erschienen in: VDI-Berichte Nr. 1900, VDI-Verlag GmbH Düsseldorf (2005), Seiten 227-246

77. K.-H. Küfer, M. Monz, A. Scherrer, P. Süss, F. Alonso, A. S. A. Sultan, Th. Bortfeld, D. Craft, Chr. Thieke

Multicriteria optimization in intensity modulated radiotherapy planning

Inverse treatment planning of intensity modulated radiotherapy is a multicriteria optimization problem: planners have to find optimal compromises between a sufficiently highdose intumor tissuethat garantuee a high tumor control, and, dangerous overdosing of critical structures, in order to avoid high normal tissue complication problems.

The approach presented in this work demonstrates how to state a flexible generic multicriteria model of the IMRT planning problem and how to produce clinically highly relevant Pareto-solutions. The model is imbedded in a principal concept of Reverse Engineering, a general optimization paradigm for design problems. Relevant parts of the Pareto-set are approximated by using extreme compromises as cornerstone solutions, a concept that is always feasible if box constraints for objective funtions are available. A major practical drawback of generic multicriteria concepts trying to compute or approximate parts of the Pareto-set is the high computational effort. This problem can be overcome by exploitation of an inherent asymmetry of the IMRT planning problem and an adaptive approximation scheme for optimal solutions based on an adaptive clustering preprocessing technique. Finally, a coherent approach for calculating and selecting solutions in a real-timeinteractive decision-making process is presented. The paper is concluded with clinical examples

and a discussion of ongoing research topics.

Keywords: multicriteria optimization, extreme solutions, real-time decision making, adaptive approximation schemes, clustering methods, IMRT planning, reverse engineering
(51 pages, 2005)

78. S. Amstutz, H. Andrä

A new algorithm for topology optimization using a level-set method

The levelset method has been recently introduced in the field of shape optimization, enabling a smooth representation of the boundaries on a fixed mesh and therefore leading to fast numerical algorithms. However, most of these algorithms use a HamiltonJacobi equation to connect the evolution of the levelset function with the deformation of the contours, and consequently they cannot create any new holes in the domain (at least in 2D). In this work, we propose an evolution equation for the levelset function based on a generalization of the concept of topological gradient. This results in a new algorithm allowing for all kinds of topology changes.

Keywords: shape optimization, topology optimization, topological sensitivity, level-set
(22 pages, 2005)

79. N. Ettrich

Generation of surface elevation models for urban drainage simulation

Traditional methods fail for the purpose of simulating the complete flow process in urban areas as a consequence of heavy rainfall and as required by the European Standard EN-752 since the bi-directional coupling between sewer and surface is not properly handled. The methodology, developed in the BMBF/EUREKA-project RisUrSim, solves this problem by carrying out the runoff on the basis of shallow water equations solved on high-resolution surface grids. Exchange nodes between the sewer and the surface, like inlets and manholes, are located in the computational grid and water leaving the sewer in case of surcharge is further distributed on the surface.

So far, it has been a problem to get the dense topographical information needed to build models suitable for hydrodynamic runoff calculation in urban areas. Recent airborne data collection methods like laser scanning, however, offer a great chance to economically gather densely sampled input data. This paper studies the potential of such laser-scan data sets for urban water hydrodynamics.

Keywords: Flooding, simulation, urban elevation models, laser scanning
(22 pages, 2005)

80. H. Andrä, J. Linn, I. Matei, I. Shklyar, K. Steiner, E. Teichmann

OPTCAST – Entwicklung adäquater Strukturoptimierungsverfahren für Gießereien Technischer Bericht (KURZFASSUNG)

Im vorliegenden Bericht werden die Erfahrungen und Ergebnisse aus dem Projekt OptCast zusammengestellt. Das Ziel dieses Projekts bestand (a) in der Anpassung der Methodik der automatischen Strukturoptimierung für Gussteile und (b) in der Entwicklung und Bereitstellung von gießereispezifischen Optimierungstools für Gießereien und Ingenieurbüros.

Gießtechnische Restriktionen lassen sich nicht auf geometrische Restriktionen reduzieren, sondern sind nur über eine Gießsimulation (Erstarrungssimulation und Eigenspannungsanalyse) adäquat erfassbar, da die lokalen Materialeigenschaften des Gussteils nicht nur von der geometrischen Form des Teils, sondern auch vom verwendeten Material abhängen. Wegen dieser Erkenntnis wurde ein neuartiges iteratives Topologieoptimierungsverfahren unter Verwendung der Level-Set-Technik entwickelt, bei dem keine variable Dichte des Materials eingeführt wird. In jeder Iteration wird ein scharfer Rand des Bauteils berechnet. Somit ist die Gießsimulation in den iterativen Optimierungsprozess integrierbar.

Der Bericht ist wie folgt aufgebaut: In Abschnitt 2 wird der Anforderungskatalog erläutert, der sich aus der Bearbeitung von Benchmark-Problemen in der ersten Projektphase ergab. In Abschnitt 3 werden die Benchmark-Probleme und deren Lösung mit den im Projekt

entwickelten Tools beschrieben. Abschnitt 4 enthält die Beschreibung der neu entwickelten Schnittstellen und die mathematische Formulierung des Topologieoptimierungsproblems. Im letzten Abschnitt wird das neue Topologieoptimierungsverfahren, das die Simulation des Gießprozesses einschließt, erläutert.

Keywords: Topologieoptimierung, Level-Set-Methode, Gießprozesssimulation, Gießtechnische Restriktionen, CAE-Kette zur Strukturoptimierung
(77 pages, 2005)

81. N. Marheineke, R. Wegener

Fiber Dynamics in Turbulent Flows

Part I: General Modeling Framework

The paper at hand deals with the modeling of turbulence effects on the dynamics of a long slender elastic fiber. Independent of the choice of the drag model, a general aerodynamic force concept is derived on the basis of the velocity field for the randomly fluctuating component of the flow. Its construction as centered differentiable Gaussian field complies thereby with the requirements of the stochastic k - ε turbulence model and Kolmogorov's universal equilibrium theory on local isotropy.

Keywords: fiber-fluid interaction; Cosserat rod; turbulence modeling; Kolmogorov's energy spectrum; double-velocity correlations; differentiable Gaussian fields

Part II: Specific Taylor Drag

In [12], an aerodynamic force concept for a general air drag model is derived on top of a stochastic k - ε description for a turbulent flow field. The turbulence effects on the dynamics of a long slender elastic fiber are particularly modeled by a correlated random Gaussian force and in its asymptotic limit on a macroscopic fiber scale by Gaussian white noise with flow-dependent amplitude. The paper at hand now presents quantitative similarity estimates and numerical comparisons for the concrete choice of a Taylor drag model in a given application.

Keywords: flexible fibers; k-ε turbulence model; fiber-turbulence interaction scales; air drag; random Gaussian aerodynamic force; white noise; stochastic differential equations; ARMA process
(38 pages, 2005)

Status quo: September 2005